

## Измельчение зеренной структуры поликристаллов в ходе пластической деформации за счет релаксации стыковых дисклинационных конфигураций

© Т.С. Орлова, А.А. Назаров\*, Н.А. Еникеев\*, И.В. Александров\*, Р.З. Валиев\*, А.Е. Романов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

\* Институт физики перспективных материалов,  
Уфимский государственный авиационный технический университет,  
450000 Уфа, Россия

Предложена и проанализирована модель формирования субструктуры поликристалла при пластической деформации, согласно которой деление зерен происходит путем образования системы диагональных малоугловых границ, растущих из ребер описывающего его прямоугольника. Формирование границ разориентации происходит за счет релаксации несимметричной квадрупольной конфигурации стыковых дисклинаций, аккумулированных в вершинах зерна при больших пластических деформациях, по достижении ими критической мощности. Рассчитана энергетика этого процесса. Проанализирован достаточно общий случай, когда мощности дисклинаций, накопленных в стыках пробного зерна, различны. Рассмотренный энергетический подход позволил определить угол разориентации  $\omega_x$  вновь образующихся границ, при котором энергетический выигрыш максимален, и его зависимость от степени анизотропии квадрупольной конфигурации стыковых дисклинаций. Установлено, что в рамках предложенной модели расщепление зерна с короткой стороной, превышающей  $0.5 \mu\text{m}$ , энергетически выгодно и приводит к уменьшению латентной энергии зерна при достаточно больших соотношениях сторон зерна ( $b/a < 30$ ) и любом соотношении мощностей стыковых дисклинаций. Показано, что минимальный достижимый размер зерен в рамках предложенной модели не превышает  $0.1 \mu\text{m}$ .

Настоящая работа поддержана проектом CRDF № REO-10505-SR-02 (Principal Investigator at LANL Dr. I.J. Beyerlein) и МОН РФ в рамках программы по твердотельным наноструктурам.

Одним из важнейших результатов эволюции дислокационной субструктуры материалов при развитой пластической деформации, общим для кристаллов различных типов, является фрагментация и измельчение зерен [1–4]. Выяснение механизмов этого процесса и его теоретическое описание приобретает в настоящее время особую важность в связи с необходимостью развития методов получения ультрамелкозернистых материалов, основанных на интенсивной пластической деформации, таких как кручение под давлением, равноканальное угловое прессование (РКУП), всесторонняя ковка и др. [5].

Экспериментальные и теоретические исследования, проведенные В.В. Рыбиным и сотрудниками, показали, что фрагментация происходит путем испускания со стыков и изломов границ зерен пар оборванных дислокационных границ, что эквивалентно образованию и движению по зерну диполя частичных дисклинаций [2–4]. Образование и рост оборванных границ происходит путем сложных перестроек дислокаций в областях зерен, прилегающих к концам этих границ, которые моделируются дисклинационным диполем. Эти перестройки включают в себя генерацию дислокаций под совместным действием приложенных напряжений и напряжений дисклинационного диполя, их скольжение и накопление с образованием границ разориентации. При этом активируются системы скольжения, в которых скалывающие напряжения превышают критическое напряжение сдвига. В работах [6–8] была предложена и исследована двумерная модель этого процесса. Ана-

лиз кинетики накопления дислокаций и дисклинаций был широко использован также в работе [9] при описании упрочнения пластически деформируемого поликристалла. Однако количественные модели, способные предсказывать эволюцию субструктуры поликристалла при интенсивной пластической деформации, до сих пор отсутствуют.

Полный трехмерный анализ процесса структурообразования в рамках теории дислокаций и дисклинаций чрезвычайно сложен, так как он должен учитывать распределение деформации зерен по системам скольжения. Вместе с тем пластическая деформация поликристаллов успешно моделируется в рамках микромеханических моделей, основанных на приближенном континуальном описании сдвига по системам скольжения. Одной из таких моделей является модель самосогласованной вязкопластичности (viscoplastic self consistent (VPSC) model) [10], главной чертой которой является рассмотрение деформации зерна, внедренного в однородную среду, моделирующую совокупность соседей данного зерна.

Важнейшим достоинством этой модели является то, что она позволяет рассчитывать накопление несоответствий деформации между зернами, которое и является причиной возникновения дисклинаций в стыках, в итоге приводящей к делению зерен. В связи с этим для моделирования эволюции субструктуры поликристалла при интенсивной пластической деформации представляется перспективной комбинация дисклинационных представ-

лений с микромеханическим моделированием. В этой комбинации роль VPSC заключается в проведении трехмерного моделирования пластической деформации поликристалла и определении несовместности тензора деформации зерен, а дисклинационной модели — в нахождении условий и характера деления зерен путем образования малоугловых границ. В этом синтезе ключевую роль играет критерий деления, который, будучи основанным на анализе возникающих дисклинационных конфигураций, позволяет определять момент, когда происходит деление, и предсказывать геометрические характеристики возникающей субструктуры (плоскости малоугловых границ, их разориентировки, формы и ориентации субзерен и т.д.).

Перспективными являются модели деления зерен, основанные на энергетическом критерии [11]. Согласно этому критерию, при определенной мощности мезодефектов, накопленных в стыках и границах зерен при деформации, энергетически выгодно их замена новой системой, которая создается образованием новых границ разориентации и соответственно делит зерно на субзерна.

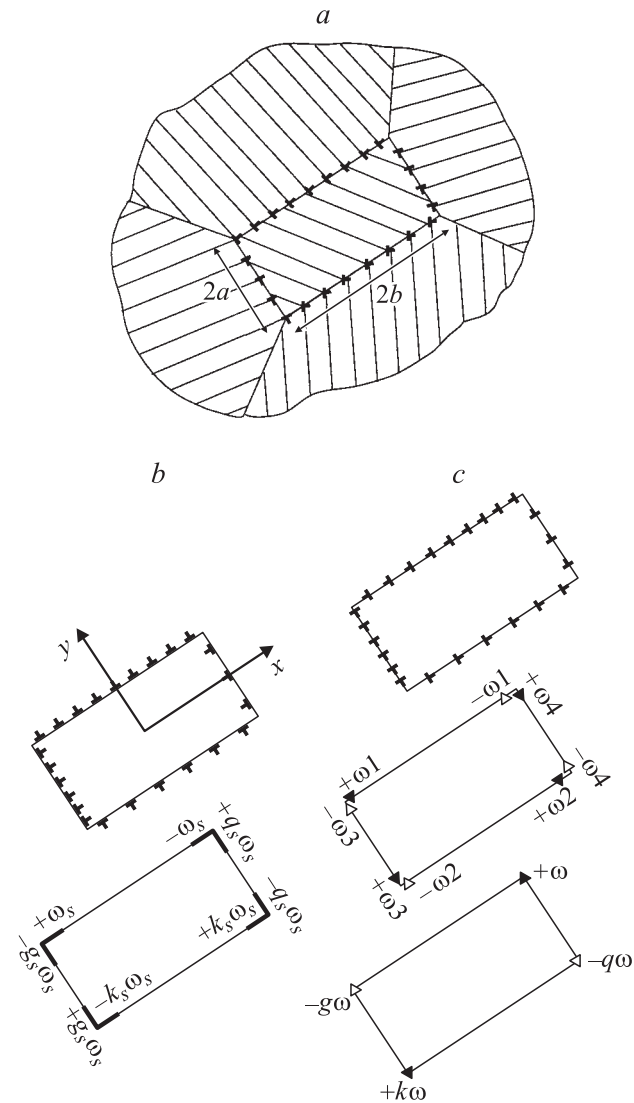
Цель настоящей работы — разработка такого критерия деления зерен, который в дальнейшем может быть использован совместно с программой моделирования VPSC.

## 1. Описание модели

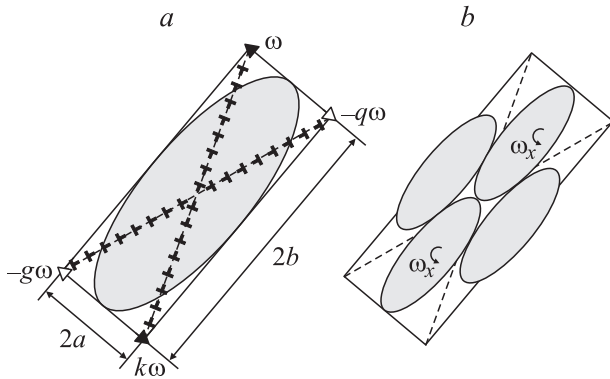
При деформировании поликристаллического образца его зерна испытывают различную деформацию. Деформация индивидуального зерна зависит от его кристаллической ориентации по отношению к окружающим его зернам и приложенной нагрузке. Для простоты рассмотрим пробное зерно в двумерном приближении в виде прямоугольника размером  $(2b \times 2a)$ . За счет разницы в деформации индивидуального зерна и окружающего материала по сторонам этого зерна формируется дислокационная структура (рис. 1, *a*) — конфигурация дефектов, обеспечивающая совместную пластическую деформацию индивидуального зерна с окружающим материалом. Эта дислокационная конфигурация может быть представлена в виде дисклинационного квадруполя и дислокаций Сомилианы. В общем случае в результате неоднородной деформации зерен, окружающих рассматриваемое пробное зерно, формируются четыре диполя дислокаций Сомилианы (рис. 1, *b*) и четыре дисклинационных диполя вдоль сторон пробного зерна, в результате чего в его вершинах формируются четыре различных дисклинации с мощностями  $\omega$ ,  $-q\omega$ ,  $-g\omega$  и  $k\omega$  (рис. 1, *c*), где  $q, g, k > 0$  — коэффициенты. Эти дисклинации образуют систему, которую в дальнейшем будем называть несимметричным дисклинационным квадруполем. Таким образом, в стыках зерен накапливаются мезодефекты двух типов: дислокации Сомилианы, которые вызывают внутренние напряжения, но не создают разориентаций, и стыковые разностные

дислокации, которые создают как напряжения, так и разориентации. Детальный анализ возникновения мезодефектов на планарных фасетках границ зерен дан в диссертации А.А. Зисмана [12].

Экспериментальные исследования и теоретические оценки, проведенные В.В. Рыбиным и его коллегами [2–4], показали, что, когда мощность дисклинации, аккумулированной в ходе пластической деформации в зернограничном стыке, достигает критической вели-



**Рис. 1.** Схема, иллюстрирующая возникновение мезоскопических дефектов на границах индивидуального зерна из-за разницы пластической деформации этого зерна и окружающей среды. *a* — разориентация действующих систем скольжения в индивидуальном зерне и окружающей его среде и сформированная в результате этой разориентации конфигурация разностных дислокаций, захваченных на границах индивидуального зерна. Разложение дефектной структуры границ зерен на равномерные скопления тангенциальных дислокаций, представляющих собой четыре диполя ДС (*b*) и стенки нормальных дислокаций, формирующих дисклинационные диполи (*c*); показана результирующая конфигурация разностных дисклинационных диполей.



**Рис. 2.** Модель расщепления пробного зерна за счет роста малоугловых границ от стыков зерна. *a* — малоугловые границы наклона (дислокационные стенки), прорастающие от стыковых дисклинаций с мощностями  $\omega$ ,  $-q\omega$ ,  $-g\omega$  и  $k\omega$ . *b* — формирование четырех новых зерен, два из которых разориентированы по отношению к исходной ориентировке зерна на угол  $\omega_x$ .

ны, равной приблизительно  $\Omega_c \approx 1-3^\circ$ , дисклинация может релаксировать за счет прорастания из этого стыка малоугловой границы. Такая граница пересекает зерно и приводит к его разделению.

Рассмотрим модель релаксации напряжений несимметричного дисклинационного квадруполя, аккумулированного в вершинах пробного зерна, путем формирования малоугловых границ вдоль его диагоналей, как это показано на рис. 2. Когда удовлетворяется геометрический критерий ( $\Omega_c \approx 1-3^\circ$ ), от стыков зерна прорастают четыре границы с некоторой разориентировкой  $\omega_x$ , при этом исходное зерно делится на субзерна по схеме, показанной на рис. 2, *b*. Большой и четыре маленьких эллипса на этом рисунке изображают исходное зерно и субзерна, описываемые в методе VPSC, в котором зерна представляются в виде эллипсоидов. Таким образом, достигается соответствие между описаниями зерен в двух моделях, т.е. в методе VPSC и дисклинационной модели.

Будем рассматривать два предельных случая: 1)  $0 < q, g, k \leq 1$ , т.е.  $\omega$  представляет собой наибольшую среди мощностей четырех дисклинаций, и 2)  $q, g, k > 1$ , т.е.  $\omega$  — наименьшая из четырех дисклинационных мощностей. Будем считать, что в обоих случаях релаксация происходит, когда  $\omega = \Omega_c$ . При этом в первом случае мощности трех дисклинаций будут меньше критической, а во втором — мощности всех дисклинаций будут превышать  $\Omega_c$ .

Деление пробного зерна путем релаксации дисклинационного квадруполя произойдет лишь в том случае, если напряжения дисклинаций способствуют дополнительной деформации зерна, приводящей к формированию малоугловых границ, складываясь с внешним деформирующим напряжением. Это имеет место, если деформация пробного зерна меньше, чем деформация окружающей среды.

## 2. Энергетический критерий расщепления зерна

Релаксация дисклинационной конфигурации, делящая зерно путем формирования диагональных границ разориентации, должна удовлетворять требованию уменьшения энергии рассматриваемой системы. Проанализируем энергетические условия такого расщепления зерна.

Разность энергии  $\Delta E$  расщепленной и нерасщепленной конфигураций складывается из следующих составляющих:

- (i) энергии четырех границ разориентации с величиной разориентации  $\omega_x$ ;
- (ii) энергии взаимодействия между этими границами и дисклинациями в вершинах пробного зерна;
- (iii) энергии взаимодействия между этими границами и четырьмя диполями дислокаций Соммианы (ДС), расположенными по сторонам пробного зерна;
- (iv) суммарной поверхностной энергии образовавшихся границ разориентации.

Каждая из образовавшихся четырех границ разориентации (полудиагональ пробного зерна) является оборванной дислокационной стенкой, которая может быть представлена дисклинационным диполем с плечом  $\sqrt{a^2 + b^2}$  и мощностью  $\omega_x$ . Энергия четырех границ разориентации с величиной разориентации  $\omega_x$  эквивалентна энергии квадруполя с плечами  $2b$  и  $2a$  и мощностью  $\pm\omega_x$  [13]

$$E^{qx} = 2D\omega_x^2 \left[ a^2 \ln \frac{b^2 + a^2}{a^2} + b^2 \ln \frac{b^2 + a^2}{b^2} \right], \quad (1)$$

где  $2a$  и  $2b$  — размеры рассматриваемого зерна (рис. 2),  $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$ ,  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона.

Энергия взаимодействия  $E_{\text{int}}^{qz/qx}$  между новыми границами и дисклинациями в вершинах пробного зерна может быть найдена как энергия, необходимая для зарождения квадруполя с плечами  $2b$  и  $2a$  и мощностью  $\pm\omega_x$  в суммарном упругом поле четырех дисклинаций, расположенных в вершинах пробного зерна

$$E_{\text{int}}^{qz/qx} = D\omega_x(1 + q + g + k) \times \left[ a^2 \ln \frac{a^2}{a^2 + b^2} + b^2 \ln \frac{b^2}{a^2 + b^2} \right]. \quad (2)$$

Определим вклад в разностную энергию взаимодействия ДС со сформировавшимися границами разориентации. Диполи ДС по сторонам пробного зерна неравносильны, т.е. мощности диполей ДС по сторонам  $2b$  равны соответственно  $\pm\omega_s$  и  $\pm q_s\omega_s$ , в то время как ДС по сторонам  $2a$  имеют мощности  $\pm g_s\omega_s$  и  $\pm k_s\omega_s$ , где  $q_s, g_s, k_s$  — коэффициенты, определяемые геометрией пластической деформации (рис. 1, *b*). Вклад в разностную энергию будет вносить энергия взаимодействия всех ДС с зародившимися границами с разориентацией  $\omega_x$ , что эквивалентно энергии взаимодействия  $E_{\text{int}}^{DS/qx}$  между

всеми диполями ДС и вновь сформировавшимся квадру-  
полем мощностью  $\pm\omega_x$ .

Эта энергия также может быть найдена как работа,  
затраченная на зарождение дисклинационного квадру-  
поля с плечами  $2b$  и  $2a$  и мощностью  $\pm\omega_x$  в упругом  
поле всех ДС. Зарождение дисклинационного квадру-  
поля происходит под действием только составляющих  
напряжения  $\sigma_{xy}$  от четырех диполей ДС, расположенных  
по четырем сторонам пробного зерна (рис. 1, *b*).

Суммарное напряжение от ряда дислокаций, состав-  
ляющих один такой диполь ДС (например, по верхней  
стороне  $2b$  рассматриваемого пробного зерна), может  
быть найдено как

$$\sigma_{xy}^{DS} = \int_{-b}^b \sigma_{xy}(x-x', y-a) \frac{dx'}{L_1}, \quad (3)$$

где дислокационная плотность  $\rho_1 = 1/L_1$ , связанная с  
мощностью  $\omega_x$  рассматриваемого диполя дислокаций ДС  
 $B = \omega_x L_1$ ,  $B$  — величина вектора Бюргера дислокаций,  
образующих диполь ДС (начало системы координат  
расположено в центре рассматриваемого зерна, как  
показано на рис. 1, *b*).

Проделав подобную операцию для всех четырех дипо-  
лей ДС и просуммировав напряжения, получим итоговое  
напряжение ДС  $\sigma_{xy}^{\Sigma DS}$ . Энергий  $E_{int}^{DS/qx}$  может быть  
определена как

$$E_{int}^{DS/qx} = \omega_x \int_{-b}^b dx \int_{-a}^a \sigma_{xy}^{\Sigma DS}(x, y) dy, \quad (4)$$

где  $2a$  и  $2b$  — плечи зарождающегося квадруполя, а  
 $\omega_x$  — его мощность.

Произведя указанные выше расчеты, можно показать,  
что эта энергия взаимодействия равна 0, т.е. в разност-  
ную энергию между расщепленной и нерасщепленной  
конфигурациями зерна вклад вносит только дисклинаци-  
онная составляющая.

Учитывая эффективную поверхностную энергию че-  
тырех границ разориентации, разностную энергию  $\Delta E$   
можно записать в следующем виде:

$$\Delta E = E^{qx} + 4\gamma d + E_{int}^{qz/qx}, \quad (5)$$

где  $d$  — длина каждой границы разориентации (в нашем  
случае  $d = \sqrt{a^2 + b^2}$ ),  $\gamma$  — эффективная поверхностная  
энергия малоугловых границ на единицу длины. Соглас-  
но [14],  $\gamma$  можно определить по формуле Рида—Шокли

$$\gamma = \frac{D}{2} \omega_x B \ln \frac{e\alpha}{2\pi\omega_x}, \quad (6)$$

где  $\alpha = 2\div 4$  — коэффициент, учитывающий вклад энер-  
гии ядер дислокаций,  $B$  — величина вектора Бюргера  
дислокаций, составляющих малоугловую границу.

Введем параметр  $p = \omega_x/\omega$ . Тогда соотношение (5) с  
учетом (1), (2) и (6) принимает следующий окончатель-  
ный вид:

$$\begin{aligned} \Delta E = D\omega^2 & \left[ -p(1+q+g+k) \right. \\ & \times \left( a^2 \ln \frac{b^2+a^2}{a^2} + b^2 \ln \frac{b^2+a^2}{b^2} \right) \\ & + 2p^2 \left( a^2 \ln \frac{b^2+a^2}{a^2} + b^2 \ln \frac{b^2+a^2}{b^2} \right) \\ & \left. + \frac{2pB}{\omega} \sqrt{a^2+b^2} \ln \frac{e\alpha}{2\pi p\omega} \right]. \quad (7) \end{aligned}$$

### 3. Анализ результатов

Анализ разности энергий расщепленного и исходно-  
го нерасщепленного зерен позволяет найти физически  
обоснованное значение  $\omega_x$ .

Рассмотрим первый случай ( $0 < q, g, k \leq 1$ ).

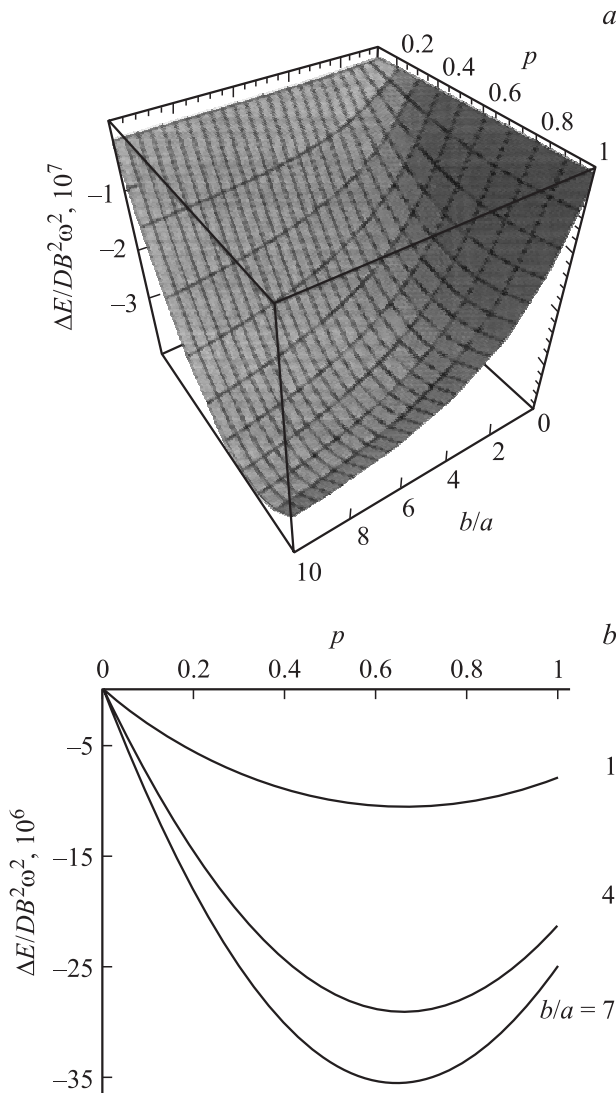
Рис. 3 показывает пример зависимости  $\Delta E$  от со-  
отношения сторон пробного зерна  $b/a$  и параметра  
 $p = \frac{\omega_x}{\omega}$ , изменяющегося в интервале от 0 до 1. Видно,  
что формирование границ разориентации вдоль диагона-  
лей пробного зерна энергетически выгодно для любого  
 $0 < p \leq 1$  и любого достаточно большого соотношения  
 $b/a$  его сторон (рис. 3, *a*). Чем больше соотношение  $b/a$ ,  
тем больше выигрыш в энергии при расщеплении зерна  
при данной исходной дисклинационной конфигурации  
(рис. 3, *b*).

При заданных значениях параметров  $a, b$  и  $q, g, k$   
существует такое значение разориентировки вновь  
образуемых границ ( $\omega_{xeq}$  или  $p_{eq}$ ), при котором до-  
стигается минимум  $\Delta E$ , т.е. максимальный выигрыш в  
энергии. Видно, что при расщеплении зерна по его  
диагоналям происходит только частичная релаксация  
мощности накопленной дисклинационной системы. Как  
видно из рис. 3, *b*, значение  $p_{eq}$  практически не зависит  
от соотношения  $b/a$ , но зависит от  $q, g$  и  $k$ .

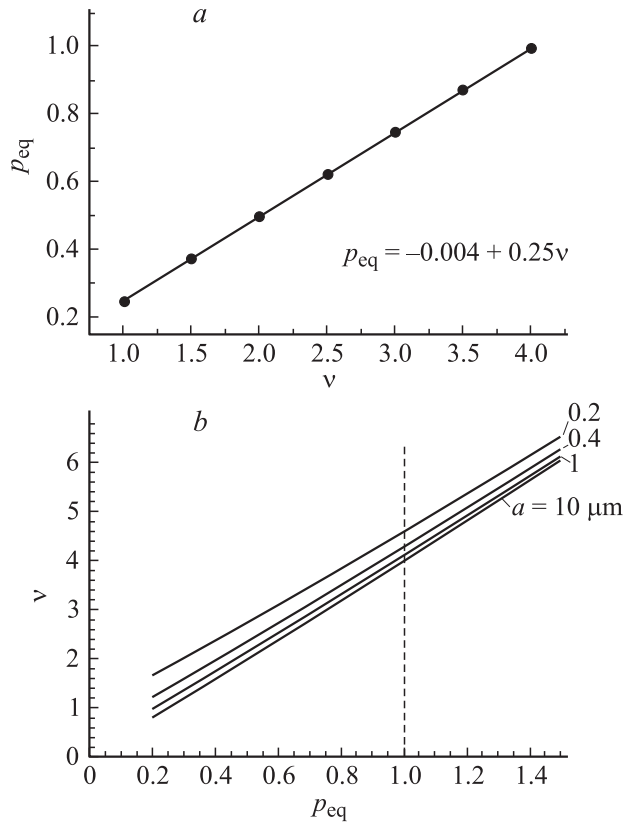
Примечательной особенностью формулы (7) является  
то, что коэффициенты анизотропии  $q, g, k$  входят в  
нее только в виде комбинации  $\nu = (1+q+g+k)$ , кото-  
рая характеризует степень симметрии дисклинационной  
конфигурации по сторонам пробного зерна: в рассмат-  
риваемом случае 1 ( $0 < q, g, k \leq 1$ )  $\nu$  уменьшается с  
увеличением степени анизотропии, а в случае 2 ( $q, g, k > 1$ ),  
наоборот, более симметричная квадруполярная  
конфигурация обладает меньшим параметром  $\nu$ . Расчеты  
показывают, что при заданном значении  $\nu$  величина  $p_{eq}$   
сохраняет свое значение, как бы ни изменялось соот-  
ношение между параметрами  $q, g$  и  $k$ . Зависимость  $p_{eq}$   
от  $\nu$  линейная (рис. 4, *a*). Чем выше степень суммарной  
анизотропии, т.е. меньше значение  $\nu$ , тем больше  $\omega_x$   
отличается от  $\omega$ . Отметим, что в частных случаях, когда  
исходная дисклинационная конфигурация представляет  
собой два дисклинационных диполя ( $g = 1, k = q$ ) или

симметричный квадруполь ( $q = g = k = 1$ ), равновесное расщепление, соответствующее минимуму  $\Delta E$ , также достигается при  $\omega_x$ , отличном от  $\omega$ , точнее при значении, несколько его меньшем. Зависимость  $p_{\text{eq}}(v)$  изменяется при изменении исходного размера зерна  $2a$ , сохраняя при этом свою линейность (рис. 4, *b*).

Данный результат позволяет сделать физическое заключение, что энергия, накопленная в дисклинационной конфигурации, не полностью релаксирует в результате одного акта деления зерна путем формирования границ разориентации, причем, чем выше степень суммарной анизотропии этой конфигурации, тем больше  $\omega_x$  отличается от  $\omega$ .



**Рис. 3.** Изменение энергии пробного зерна при его расщеплении малоугловыми границами. *a* — общая зависимость  $\Delta E$  от соотношения сторон пробного зерна  $b/a$  и параметра  $p = \frac{\omega_x}{\omega}$  для  $p$  от 0 до 1.  $v = 2.8$ ,  $a = 1 \mu\text{m}$ . *b* — частный случай зависимости  $\Delta E$  от параметра  $p = \frac{\omega_x}{\omega}$  для различного соотношения сторон пробного зерна  $b/a = 1, 4, 7$ .  $v = 2.8$ ,  $a = 1 \mu\text{m}$ .



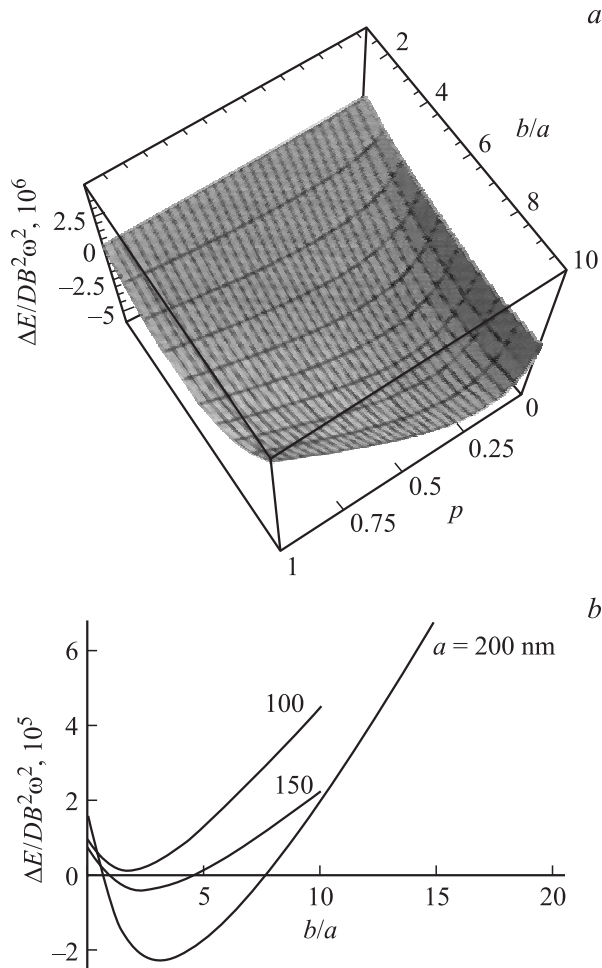
**Рис. 4.** Соотношение между параметрами модели. *a* — зависимость параметра  $p_{\text{eq}}$ , соответствующего формированию равновесных границ разориентировки, от параметра  $v$ , характеризующего симметрию дисклинационной конфигурации в вершинах пробного зерна.  $a = b = 1 \mu\text{m}$ . *b* — соотношение между  $p_{\text{eq}}$  и параметром симметрии  $v$  для различного исходного размера зерна  $a = b = 0.2, 0.4, 1$  и  $10 \mu\text{m}$ .

В рамках рассмотренной модели возможно увеличение мощности дисклинаций в некоторых стыках в результате разделения пробного зерна вдоль диагоналей. Таким образом, релаксация запасенной энергии может приводить к дополнительной концентрации внутренних напряжений на таких стыках, которые в свою очередь могут инициировать деление соседнего зерна.

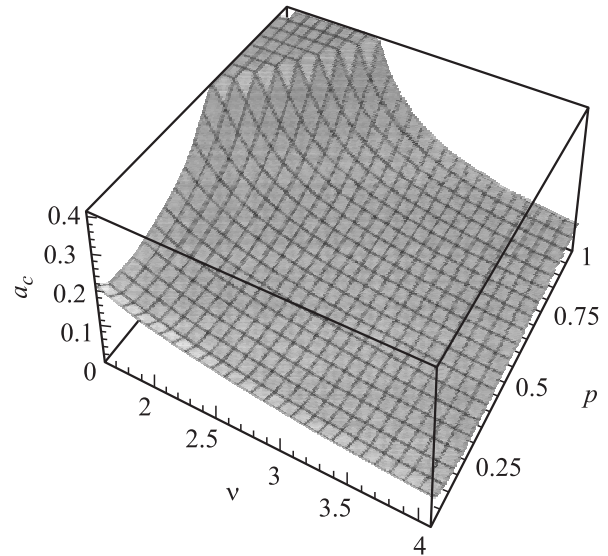
Отметим, что размер исходного зерна также играет важную роль. Энергетика процесса была проанализирована для интервала размеров зерен от  $0.05 \mu\text{m}$  до  $0.5 \mu\text{m}$ ; обнаружено, что расщепление пробного зерна путем формирования границ разориентации вдоль диагоналей зерна остается энергетически выгодным только до момента достижения зерном некоторого предельного размера  $2a_c$ , который зависит от параметра  $v$ . Дальнейшее измельчение зерна в рамках рассмотренной модели становится энергетически невыгодным.

На рис. 5, *a* показан пример зависимости разностной энергии  $\Delta E$  от параметра расщепления  $p$  и соотношения сторон зерна  $b/a$  для зерна с исходным минимальным размером  $2a = 0.4 \mu\text{m}$ . Видно, что существуют такие значения соотношения  $b/a$  и параметра  $p$  (а следо-

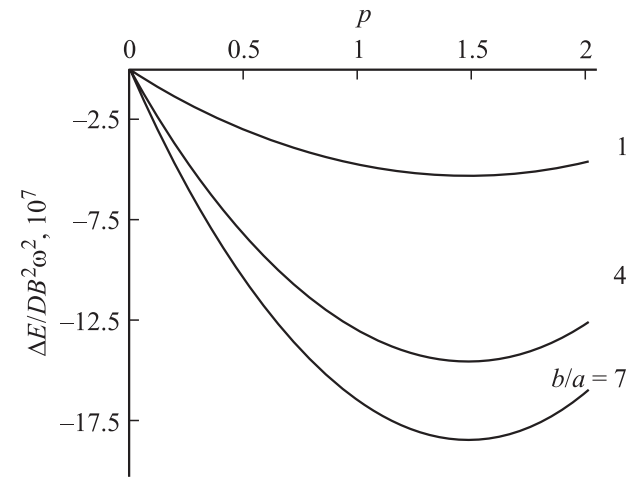
вательно, и параметра симметрии  $\nu$ ), при которых разностная энергия положительна, т.е. деление зерна энергетически невыгодно. Рис. 5, *b* демонстрирует зависимость разностной энергии от соотношения  $b/a$  для зерен с разными значениями исходного размера для заданного значения параметра  $\nu = 3$ . Интервал значений соотношения  $b/a$  становится ограниченным при достижении большой степени размельчения зерен. Например, при выборе критического значения  $\Omega_c = 1^\circ$  и параметра симметрии  $\nu = 3$ , начиная с размера  $2a \approx 400$  nm, энергетически невыгодно деление зерен с соотношением сторон  $b/a > 7$ , а для  $2a \approx 300$  nm — с соотношением  $b/a > 4-5$ . Оценки показывают, что в случае критерия  $\Omega_c = 1^\circ$  для зерен с минимальным размером более  $2a = 0.8-1 \mu\text{m}$  энергетическая выгода деления сохраняется при любом значении параметра  $\nu$  для соотношения сторон  $b/a \leq 30$ . Для критерия  $\Omega_c = 3^\circ$  ограничения на соотношение сторон  $b/a$  еще мягче: при размерах выше  $2a = 0.5 \mu\text{m}$  зерна делятся при соотношении сторон  $b/a \leq 30$ .



**Рис. 5.** Энергетический выигрыш при расщеплении зерна в зависимости от его неравноосности. *a* — зависимость  $\Delta E$  от соотношения сторон пробного зерна  $b/a$  и параметра  $p = \frac{\omega_x}{\omega}$ .  $\nu = 3$ ,  $a = 200$  nm. *b* — зависимость  $\Delta E$  от  $b/a$  для разного исходного размера зерна  $a = 200, 150$  и  $100$  nm.  $\nu = 2.1$ .



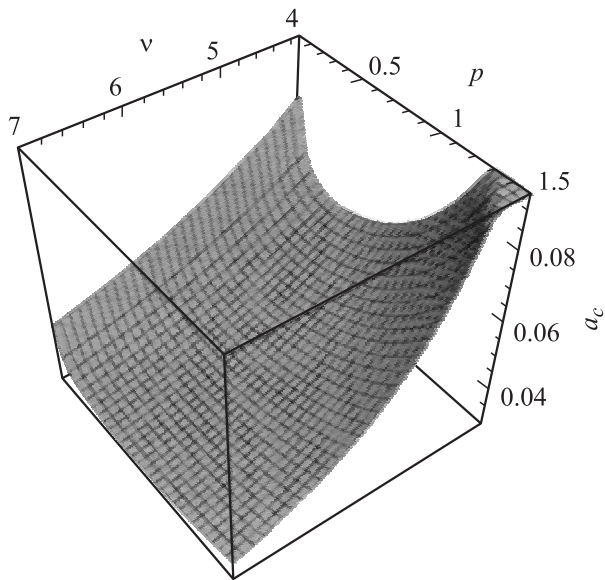
**Рис. 6.** Зависимость критического размера зерна  $a_c$  от параметров  $p$  и  $\nu$  при  $\Omega_c = 1^\circ$  и  $a = b$ . Значения  $a_c$  приведены в микронах.



**Рис. 7.** Зависимость энергетического выигрыша  $\Delta E$  от параметра  $p = \frac{\omega_x}{\omega}$  для различного соотношения сторон пробного зерна  $b/a = 1, 4, 7$ ;  $\nu = 6$ ,  $a = 1 \mu\text{m}$ .

Произведем оценку критического минимального размера зерна  $2a_c$ . Зависимость  $a_c$  от параметра симметрии  $\nu$  и параметра расщепления  $p$  для случая  $\Omega_c = 1^\circ$  показана на рис. 6. Учитывая зависимости  $p_{eq}$  от  $\nu$  (рис. 4), получаем следующие ограничения по размеру исходного зерна для деления зерна в рассматриваемой модели:  $2a_c \approx 300$  nm при  $\Omega_c = 1^\circ$  и  $2a_c \approx 100$  nm при  $\Omega_c = 3^\circ$ .

Рассмотрим теперь второй случай ( $q, g, k > 1$ ), когда предполагается, что релаксация несимметричного дис-



**Рис. 8.** Зависимость критического размера зерна  $a_c$ ,  $\mu$  от параметра симметрии  $\nu$  и параметра расщепления  $p$  для случая  $\Omega_c = 1^\circ$ . Значения  $a_c$  приведены в микронах

клинационного квадруполь происходит при достижении дисклинацией с минимальной мощностью критической величины  $\Omega_c$ .

Анализ разностной энергии показывает, что расщепление зерна путем формирования малоугловых границ разориентации энергетически выгодно также и в этом случае, причем выигрыш в энергии почти на порядок больше для равнозначных исходных параметров. Рис. 7 демонстрирует зависимость  $\Delta E$  от параметра  $p = \frac{\omega_x}{\omega}$  для различного соотношения сторон пробного зерна  $b/a$ . В этом случае равновесная разориентация  $\omega_{x\text{eq}}$  возникших вдоль диагоналей границ всегда больше минимальной мощности  $\omega$  исходных дисклинаций.

На рис. 8 приведена зависимость  $a_c$  от параметра симметрии  $\nu$  и параметра расщепления  $p$  для силового критерия  $\Omega_c = 1^\circ$ . Видно, что ограничения на исходный размер зерна для расщепления в рамках рассматриваемой модели существенно мягче в случае 2 по сравнению со случаем 1. Оценка критического размера зерна для расщепления дает значение  $2a_c \approx 100$  nm для  $\Omega_c = 1^\circ$  и  $2a_c \approx 50$  nm для  $\Omega_c = 3^\circ$ , т.е. рассматриваемая модель (случай 2) описывает практически любую достигаемую в эксперименте степень измельчения зерен.

Таким образом, рассмотрена модель релаксации несимметричной дисклинационной конфигурации, формирующейся в стыках зерна в результате неоднородной пластической деформации, путем формирования малоугловых границ разориентации вдоль диагоналей пробного зерна. Анализ показывает, что для зерен с длинной короткой стороны, превышающей примерно  $0.5 \mu\text{m}$ , такое деление является энергетически выгодным при любом соотношении сторон зерна и любой разориентировке вновь образованных границ в интервале от 0 до  $\omega$ . Чем больше  $b/a$ , тем больше высвобождение

упругой энергии  $|\Delta E|$  при делении зерна по диагоналям. Равновесная разориентировка малоугловых границ  $\omega_{x\text{eq}}$  не равна  $\omega$ , она почти не зависит от соотношения сторон пробного зерна, а зависит от степени симметрии  $\nu$  исходной дисклинационной конфигурации. Найдено аналитическое выражение для этой зависимости, позволяющее учитывать равновесное значение  $\omega_{x\text{eq}}$ . Проанализированы условия деления зерен с минимальными размерами от  $50$  nm до  $0.5 \mu\text{m}$ , которые зависят от параметра симметрии  $\nu$  и геометрии зерна. Показано, что существует предельный размер пробного зерна, равный примерно  $100$  nm, ниже которого данная модель не работает с точки зрения энергетического критерия.

В работе [15] с помощью программы VPSC было проведено моделирование эволюции текстуры и измельчения зерен при (РКУП). При этом был использован весьма простой критерий деления, не имеющий достаточного физического обоснования: считалось, что зерно делится, если соотношение его длинной и короткой сторон превышает 5. Результаты, полученные в данной работе, могут быть внедрены в указанную программу в качестве физически обоснованного критерия деления. Моделирование РКУП с помощью предложенной комбинированной модели составит предмет следующей статьи.

## Список литературы

- [1] В.И. Трефилов, В.Ю. Мильман, С.А. Фирстов. Физические основы прочности тугоплавких металлов. Наук. думка, Киев (1975). 315 с.
- [2] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М. (1986). 224 с.
- [3] В.В. Рыбин. Изв. вузов. Физика **34**, 3, 7 (1991).
- [4] В.В. Рыбин. Вопросы материаловедения **29**, 1, 11 (2002).
- [5] Р.З. Валиев, И.В. Александров. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. Логос, М. (2000). 272 с.
- [6] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. ФТТ **20**, 3114 (1978).
- [7] А.А. Зисман. Solid State Phenom. **87**, 147 (2002).
- [8] К.Н. Микаелян, М. Seefeldt, М.Ю. Гуткин, А.Е. Романов. ФТТ **45**, 2002 (2003).
- [9] M. Seefeldt, L. Delannay, B. Peeters, E. Aernoudt, P. van Houtte. Acta Mater. **49**, 2129 (2001).
- [10] R.A. Lebensohn, C.N. Tome. Acta Metal. Mater. **41**, 2611 (1993).
- [11] A.E. Romanov, T.S. Orlova, N.A. Enikeev, A.A. Nazarov, I.V. Alexandrov, R.Z. Valiev. In: Ultrafine Grain Materials III / Ed. Y.T. Zhu, T.G. Langdon, R.Z. Valiev, S.L. Semiatin, D.H. Shin, T.C. Lowe. TMS (2004). 211.
- [12] А.А. Зисман. Автореф. докт. дис. СПбГПУ, СПб (2003). 35 с.
- [13] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Наука, Л. (1986). 224 с.
- [14] J. Hirth, I. Lothe. Theory of Dislocations. Wiley, N. Y. (1982). 752 p.
- [15] I.J. Beyerlein, R.A. Lebensohn, C.N. Tome. Mater. Sci. Eng. A **345**, 122 (2003).