

**Physico-mathematical Sciences****Физико-математические науки**

UDC 539.4; 669.3

**Theoretical Analysis of Non-equilibrium Grain Boundaries Diffusion Properties Recovery during Ultra-fine Grain Metals and Alloys Annealing \***<sup>1</sup>Vladimir N. Chuvil'deev<sup>2</sup>Vladimir I. Kopylov<sup>3</sup>Aleksey V. Nokhrin<sup>4</sup>Olga E. Pirozhnikova<sup>1</sup>Lobachevsky state university of Nizhni Novgorod, Russian Federation

23/3 Gagarina av., 603950, Nizhni Novgorod

Dr., Professor

E-mail: chuvildeev@nifti.unn.ru

<sup>2</sup>Physico-Technical Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Belarus

10 Kuprevicha str., 220141, Minsk

E-mail: Kopylov.ecap@gmail.com

<sup>3</sup>Lobachevsky state university of Nizhni Novgorod, Russian Federation

23/3 Gagarina av., 603950, Nizhni Novgorod

PhD

E-mail: nokhrin@nifti.unn.ru

<sup>4</sup>Lobachevsky state university of Nizhni Novgorod, Russian Federation

23/3 Gagarina av., 603950, Nizhni Novgorod

PhD

E-mail: opiro@mail.ru

**Abstract.** The article presents the results of theoretical analysis of non-equilibrium grain boundaries diffusion properties recovery during ultra-fine grain (UFG) materials annealing, produced by severe plastic deformation (SPD) method. The paper proves that activation energy and grain boundary diffusion coefficient of UFG materials depend on density of defects, cumulated by grain boundary during SPD.

Annealing causes diffusion redistribution of defects in grain boundaries, which results in diffusion properties change. Diffusion properties recovery rate depends on grain size and it is much higher in UFG materials than in coarse-grained materials.

**Keywords:** Ultra-fine grain metals; non-equilibrium grain boundaries; recovery; diffusion.

**Введение.** Вопрос о диффузионных свойствах границ зерен в ультрамелкозернистых (УМЗ) материалах, полученных методами интенсивного пластического деформирования (ИПД) [1-6], представляется весьма важным в связи с изучением деформационного поведения УМЗ материалов [1, 2, 7]. Следует отметить также, что диффузионные свойства границ зерен УМЗ материалов оказывают определяющее влияние на процессы эволюции их зеренной и дислокационной структуры, а также процессы, связанные с зернограницными сегрегациями примесей и легирующих элементов [1-2, 4-9]. Кроме того, диффузионные свойства границ зерен отражают структурное состояние границ и их изучение позволяет понять особенности строения границ зерен, формируемых в процессе интенсивной пластической деформации [1, 2].

Вопрос о диффузионных свойствах границ зерен в УМЗ материалах оказывается весьма нетривиальным, поскольку эти свойства в силу неравновесного состояния границ

---

\* Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №12-08-33080-мол\_a\_вед, 13-03-97109) и Министерства образования и науки Российской Федерации (государственный контракт №14.513.11.0049).

зерен УМЗ материалов непрерывно изменяются в процессе измерения и зависят от времени изотермической выдержки при повышенной температуре [1, 10-11].

Непрерывное изменение диффузионных свойств границ зерен в процессе измерений весьма затрудняет интерпретацию экспериментальных результатов и, по нашему мнению, является одной из основных причин существенных разногласий в оценках коэффициента зернограницной диффузии  $D_b^*$  и энергии активации зернограницной диффузии  $Q_b^*$ , приводимых разными авторами [4-6, 8-9, 12-16].

В частности, в ряде работ обнаружено, что в УМЗ металлах диффузионные свойства границ зерен существенно отличаются от обычных. В работах [4, 6, 9, 16] было обнаружено, что энергия активации зернограницной диффузии ( $Q_b^*$ ) на 20-40% ниже значений, характерных для равновесных границ  $Q_b$  [17]. В работах [1-2, 4, 8, 13-15] приведены данные о значениях  $D_b^*$  на 2-3 порядка превышающих обычные значения  $D_b$ , характерные для границ зерен в крупнозернистых металлах и т.д.

В то же время в работах [6, 12] изменений диффузионных свойств границ зерен в некоторых УМЗ металлах не было зафиксировано.

В настоящей работе описан процесс возврата диффузионных свойств границ зерен УМЗ материалов при отжиге после ИПД и предложена модель, позволяющая рассчитать зависимость коэффициента  $D_b^*$  от времени и температуры отжига.

### **Диффузионные свойства неравновесных границ зерен. Основные уравнения теории неравновесных границ зерен**

Основные положения теории неравновесных границ зерен (НГЗ) в металлах и сплавах подробно изложены в [2, 7, 18]. Здесь мы кратко суммируем основные результаты необходимые для описания диффузионных свойств НГЗ в УМЗ металлах.

В соответствии с [1-2, 7, 18] причиной изменения диффузионных свойств границ зерен является изменение свободного объема границ ( $\alpha$ ) вследствие попадания в границы различных дефектов (в первую очередь – дислокаций, а также атомов примеси и легирующих элементов), приносящих в границы дополнительный свободный объем  $\Delta\alpha$ . Таким образом, при решении задач о поведении НГЗ вместо обычного значения коэффициента зернограницной диффузии  $D_b(\alpha)$  необходимо использовать коэффициент диффузии в неравновесных границах зерен  $D_b^*(\alpha+\Delta\alpha)$ .

Одним из основных процессов, оказывающих существенное влияние на величину свободного объема  $\Delta\alpha$ , является процесс взаимодействия границ зерен с решеточными дислокациями, сопровождающийся делокализацией ядер попавших в границы дислокаций. При таком взаимодействии в границах зерен образуются дислокации ориентационного несоответствия (ДОН) и продукты их делокализации. Делокализирующиеся дислокации отдают свой свободный объем границам и меняют их энергию и диффузионные свойства [7, 18]. Кроме того, распределенные в границах зерен ДОН и продукты их делокализации создают поля внутренних напряжений, которые оказывают влияние на деформационное поведение УМЗ металлов [19-21]. Следует также отметить, что аккумулирующиеся на границах зерен дефекты влияют на подвижность границ и таким образом изменяют характер их миграции [21, 23].

В связи с исключительной ролью, которую играют внесенные в границы зерен решеточные дислокации, приведем здесь систему уравнений, описывающих кинетику накопления этих дефектов в границах зерен:

1. Температурная зависимость коэффициента диффузии в НГЗ:

$$D_b^* = D_{b0}^* \exp(-Q_b^* / kT), \quad (1)$$

где  $D_{b0}^*$  и  $Q_b^*$  - предэкспоненциальный множитель и энергия активации в выражении для коэффициента диффузии по НГЗ, соответственно,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура.

2. Выражение для расчета энергии активации и предэкспоненциального множителя коэффициента диффузии в неравновесных границах зерен [2]:

$$Q_b^* = W_1(\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha) - 1) + W_2([\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha)]^{1/2} - 1) + Q_L, \quad (2)$$

$$D_{b0}^* = \varphi D_{L0} \exp\{Z_1(\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha) - 1) + Z_2([\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha)]^{1/2} - 1)\}, \quad (3)$$

где  $W_1, W_2, Z_1, Z_2$  – численные коэффициенты, зависящие от термодинамических и кристаллографических параметров материала ( $W_1 = 2\pi(\lambda\rho b^2\delta/2 + \gamma_{S/L}^0 b^2 - \gamma_0 b^2/2)$ ,  $W_2 = 4\pi\gamma_{S/L}^0 b^2$ ,  $Z_2 = 4\pi S_{S/L} b^2$ ,  $Z_1 = 2\pi(\lambda\rho b^2\delta/2T_m + S_{S/L} b^2)$ ). Численные значения параметров приведены в табл. 1 (см. также [2]).

3. Уравнение, связывающее величину избыточного свободного объема границ зерен  $\Delta\alpha$  с плотностью ДОН ( $\rho_b$ ) и плотностью скользящих компонент делокализованных дислокаций ( $w_t$ ):

$$\Delta\alpha = (\rho_b \Delta b + w_t) / w_0, \quad (4)$$

где  $w_0=0.1$  – численный коэффициент [2],  $\Delta b$  – вектор Бюргерса ДОН.

4. Выражение для коэффициента диффузии в НГЗ в случае, когда плотность дефектов в границах зерен невелика ( $\alpha + \Delta\alpha \ll \alpha^*$ ) [1-2]:

$$D_b^* = D_b \exp(\Delta\alpha(\rho_b, w_t) / \alpha_B). \quad (5)$$

5. Уравнения, описывающие кинетику изменения ДОН и скользящих компонент делокализованных дислокаций в границах зерен в условиях возврата:

$$\dot{\rho}_b = -\rho_b / t_1. \quad (6)$$

$$\dot{w}_t = -w_t / t_2. \quad (7)$$

6. Выражения, описывающие время диффузионного ухода из границы ДОН ( $t_1$ ) и скользящих компонент вектора Бюргерса делокализованных дислокаций ( $t_2$ ):

$$t_1 = A_1 kT / (\rho_b \Delta b)^3 D_b^* \delta G, \quad (8)$$

$$t_2 = (d/b)^2 kT / C_1 w_t D_b^* \delta G, \quad (9)$$

где  $A_1$  и  $C_1$  – численные коэффициенты [2],  $\delta$  – ширина границы зерна,  $G$  – модуль сдвига.

7. Выражение для среднего размера зерна, при котором плотность ДОН равна плотности скользящих компонент делокализованных дислокаций:

$$d_1 / b = (D_b^* \delta G / \dot{\epsilon}_v kT)^{1/4} \xi_1^{1/2}. \quad (10)$$

где  $\dot{\epsilon}_v$  – скорость внутризеренной пластической деформации при ИПД,  $\xi_1$  – доля дислокаций одного знака, попадающих в границу зерна [2].

Отметим, что при малых размерах зерен  $d < d_1$  (мелкозернистые металлы), в силу зависимости плотности скользящих компонент делокализованных дислокаций от размера зерна (см. уравнения (7) и (9)), выполняется приближенное равенство  $\square_b \square_b \gg w_t$ , а при  $d > d_1$  (крупнозернистые металлы) выполняется соотношение  $w_t \gg \rho_b \Delta b$ .

Таким образом, в материалах с размером зерна  $d > d_1$  и  $d < d_1$ , выражение для  $D_b^*$  может быть представлено в виде:

$$D_b^* = D_b \exp(w_t / w_0 \alpha_B), \quad (\text{при } d > d_1), \quad (11)$$

$$D_b^* = D_b \exp(\rho_b \Delta b / w_0 \alpha_B), \quad (\text{при } d < d_1). \quad (12)$$

8. Величина внутреннего поля напряжений  $\sigma_i$ , создаваемого ДОН и скользящими компонентами делокализованных дислокаций имеет виде:

$$\sigma_i^{\rho_b} = \varphi_1 G \rho_b \Delta b. \quad (13)$$

$$\sigma_i^{w_t} = \varphi_2 G w_t. \quad (14)$$

Суммарное поле внутренних напряжений может быть представлено в виде:  
 $\sigma_i = \varphi_1 G \rho_b \Delta b + \varphi_2 G w_t$  (где  $\varphi_1, \varphi_2 \sim 1$ ).

Полученные уравнения позволяют решать разнообразные задачи, касающиеся поведения неравновесных границ зерен, в частности, в УМЗ материалах [1-2, 7], и описывать изменения диффузионных свойств границ зерен в различных условиях.

Рассмотрим процесс возврата диффузионных свойств НГЗ при отжиге УМЗ материалов подробнее.

Таблица 1.

**Значения параметров, используемых для расчетов [1-2, 17]**

Параметры	Обозначение	Един. измерения	Численное значение		
			Cu	Ni	Ti
<b>Кристаллографические параметры</b>					
Вектор Бюргерса	$b$	м	$2.56 \cdot 10^{-10}$	$2.49 \cdot 10^{-10}$	$2.95 \cdot 10^{-10}$
Атомный объем	$\Omega$	м <sup>3</sup>	$1.18 \cdot 10^{-29}$	$1.09 \cdot 10^{-29}$	$1.76 \cdot 10^{-29}$
Размер зерна	$d$	б	$2 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^5$
<b>Термодинамические и упругие константы</b>					
Модуль сдвига	$G$	$G\Omega/kT_m$	50		
Температура плавления	$T_m$				
Удельная теплота плавления	$\lambda$	$\lambda \rho b^3/kT_m$	1.15	1.50	1.50
Плотность	$\rho$				
Скачок объема при плавлении	$\Delta V_m$	-	5·10 <sup>-2</sup>		
<b>Параметры границ раздела</b>					
Энтальпия поверхности жидкость-кристалл	$\gamma_{S/L}^0$	$\gamma_{S/L}^0 b^2 / kT_m$	0.900	0.971	0.971
Энтропия поверхности жидкость-кристалл	$S_{S/L}$	$S_{S/L} b^2 / k$	0.767	0.833	0.833
Относительный свободный объем границ зерен	$\alpha$	-	0.36	0.37	0.38
Критический свободный объем границ зерен	$\alpha^*$	-	0.50		
Свободная энергия границы зерна ( $T=0.5T_m$ )	$\gamma_b$	$\gamma_b b^2 / kT_m$	1.93	1.90	1.90
Свободная энергия «сухих» участков границы	$\gamma_0$	$\gamma_0 b^2 / kT_m$	1.95	1.92	1.92
Энтальпия границы зерна	$\gamma_b^0$	$\gamma_b^0 b^2 / kT_m$	4.32	4.63	4.63
Энтропия границы зерна	$S_b$	$S_b b^2 / k$	2.30	2.51	2.51
<b>Диффузионные свойства</b>					
Предэкспоненциальный множитель коэффициента зернограничной диффузии	$\delta D_{b0}$	м <sup>3</sup> /с	$5.0 \cdot 10^{-15}$	$3.5 \cdot 10^{-15}$	$3.6 \cdot 10^{-16}$
Энергия активации зернограничной самодиффузии	$Q_b$	$Q_b / kT_m$	9.2	9.0	9.0
Предэкспоненциальный множитель коэффициента диффузии в расплаве	$D_{L0}$	м <sup>2</sup> /с	$14.6 \cdot 10^{-8}$	$9.7 \cdot 10^{-8}$	$9.7 \cdot 10^{-8}$
Энергия активации диффузии в расплаве	$Q_L$	$Q_L / kT_m$	3.6	3.3	3.8

**Возврат диффузионных свойств неравновесных границ зерен при отжиге УМЗ материалов**

1 Описание модели

В случае процессов возврата при нагреве, когда внешние напряжения равны нулю и когда деформация отсутствует, а миграция границ еще не началась, уравнения (6)-(7) для плотности дефектов в границах зерен принимают вид:

$$\dot{\rho}_b \Delta b = -(\rho_b \Delta b)^4 / t'_1, \quad \rho_b = \rho_{b0} \text{ при } t=0. \quad (17)$$

$$\dot{w}_t = -w_t^2 / t'_2, \quad w_t = w_{t0} \text{ при } t=0. \quad (18)$$

где  $t'_1 = A_1 kT / D_b^* \delta G \Omega$ ,  $t'_2 = (d/b)^2 kT / C_1 D_b^* \delta G \Omega$ .

Решая указанные выше уравнения нетрудно определить зависимость плотностей дефектов в границе зерна от времени, и, в соответствии с (1) - (3), найти зависимость параметров зернограницной диффузии от времени выдержки.

В наиболее распространенном случае, когда плотности различных типов дефектов в границе сопоставимы ( $\rho_b \Delta b \approx w_t$ ) система уравнений (17)-(18) не имеет аналитических решений и ее необходимо решать численно. В случае, когда в границах зерен доминирует только один тип дефектов (или ДОН ( $\Delta\alpha = \rho_b \Delta b / w_0$ ), или скользящие компоненты делокализованных дислокаций ( $\Delta\alpha = w_t / w_0$ )), уравнения (6)-(7) и (17)-(18) существенно упрощаются. В приближении  $\Delta\alpha \ll \alpha$  выражения для плотности дефектов могут быть представлены в виде:

$$\rho_b \Delta b(t) = \frac{\rho_{b0} \Delta b}{\sqrt[3]{1 + 3(\rho_{b0} \Delta b)^3 (\delta D_b^* / b^3 A_1) (G \Omega / kT) t}} \quad (\text{при } \rho_b \Delta b \gg w_t), \quad (19)$$

$$w_t(t) = \frac{w_{t0}}{1 + C_1 w_{t0} (\delta D_b^* / b^3) (b/d)^2 (G \Omega / kT) t} \quad (\text{при } w_t \gg \rho_b \Delta b), \quad (20)$$

где  $\rho_{b0}$  и  $w_{t0}$  – начальные плотности дефектов (в момент времени  $t=0$ ).

Подставляя (19) и (20) в уравнения (10) и (11), соответственно, получим следующие выражения для зависимости коэффициента зернограницной диффузии от времени отжига на поздних стадиях процесса возврата (при  $\rho_b(t, T) \ll \rho_{b0}$ ,  $w_t(t, T) \ll w_{t0}$ ):

$$D_b^* = D_{b0}^* \exp(\zeta_1 / t^{1/3}), \quad (21)$$

$$D_b^* = D_{b0}^* \exp(\zeta_2 d^2 / t), \quad (22)$$

где  $\zeta_1 = \frac{1}{\alpha_B w_0} \left[ \frac{b^3 A_1}{\delta D_b^*} \frac{kT}{G \Omega} \right]^{1/3}$ ,  $\zeta_2 = \frac{1}{\alpha_B w_0 C_1} \left[ \frac{b}{\delta D_b^*} \frac{kT}{G \Omega} \right]$  – численные

коэффициенты.

Анализ выражений (21) и (22) показывает, что в зависимости от условий ИПД, условий охлаждения, а также времени и температуры последующей выдержки, неравновесность может быстро «исчезнуть», а может и сохраняться в границах зерен довольно долгое время. Это означает, что при анализе величины  $D_b^*$  в экспериментальных исследованиях необходимо учитывать влияние всех указанных параметров, а этого, к сожалению, как известно не происходит.

2 Сопоставление с экспериментом

Принципиальное значение при исследовании диффузионных свойств границ зерен имеет проверка сделанного выше предсказания о различиях в кинетике возврата в крупнозернистых и в УМЗ материалах. В экспериментах это должно проявляться в существенном отличии в кинетике изменения диффузионных параметров при отжиге материалов с разным размером зерна. Как следует из модели, изменение  $Q_b$  со временем в

более крупнозернистых материалах при прочих равных условиях должно происходить гораздо медленнее, чем в УМЗ материалах.

Для проверки этого результата обратимся к работам, в которых исследованы процессы возврата диффузионных свойств при отжиге УМЗ материалов, а также предварительно деформированных крупнозернистых материалов.

### 2.1 Крупнозернистые материалы

В работах [23-25] для анализа кинетики возврата используются данные о характере процесса делокализации решеточных дислокаций, внесенных в границы зерен при предварительной пластической деформации алюминия и аустенитной стали. Как известно [26, 27], изучение процесса делокализации позволяет определять диффузионные характеристики границ зерен и, в частности, оценивать скорость изменения диффузионных свойств границ при отжиге после деформации.

В [23, 24] исследованы две группы поликристаллов S и G высокочистого алюминия, со средним размером зерна 4 и 22 мкм ( $d > d_1$ ), соответственно, подвергнутых одинаковой предварительной деформации  $\varepsilon = 1.5\%$ . Первичные экспериментальные данные представляют собой зависимости относительного числа границ зерен (1-x), содержащих неде локализованные дислокации, от времени отжига  $t$  при температурах  $T = 293, 343, 373$  и  $403$  К. Показано, что для поликристалла с  $d = 22$  мкм для достижения при  $T = 403$  К значений энергии активации близких к равновесному ( $Q_b = 77.5$  кДж/моль) требуется  $4 \cdot 10^6$  с, а в поликристаллах с  $d = 4$  мкм для достижения аналогичного значения  $Q_b$  при этой же температуре требуется время  $2 \cdot 10^5$  с, что в  $\sim 20$  раз меньше.

В работе [25] методом, аналогичным описанному выше, проведено исследование процессов отжига внесенных в границы зерен дислокаций в аустенитных сталях, имеющих размер зерен 2.1 и 30 мкм (для  $\gamma$ -железа при  $T = 653$  К,  $t \sim 10^4$  с (см. условия эксперимента в [25]) и  $Q_b^* = 8$  кТм, величина критического размера зерна  $d_1 \sim 21$  мкм). Было показано, что в стали с размером зерна  $d = 30$  мкм  $> d_1$  для достижения значения  $Q_b = 190$  кДж/моль при  $T = 653$  К и  $673$  К требуется время отжига  $\sim 2 \cdot 10^4$  с и  $\sim 10^3$  с, соответственно, а для стали с  $d = 2.1$  мкм - время  $\sim 800$  с и  $\sim 300$  с, соответственно.

Более подробный анализ результатов [23-25] проведен в [10].

Перейдем теперь к анализу процессов возврата в УМЗ материалах.

### 2.2 Возврат диффузионных свойств границ зерен при отжиге УМЗ материалов

Поскольку работы, в которых проведены прямые измерения зависимости величин  $D_b^*$  или  $Q_b^*$  от времени отжига в УМЗ материалах практически отсутствуют, используем для анализа кинетики возврата косвенные данные, полученные при рентгеноструктурных исследованиях этих материалов.

#### а) Ультрамелкозернистый медный сплав $Cu-0.5\%Al_2O_3$

В работе [28] описаны результаты исследований влияния низкотемпературных дорекристаллизационных отжигов на внутренние напряжения в сплаве  $Cu-0.5\%Al_2O_3$ , УМЗ структура которого была сформирована методом кручения под квазигидростатическим давлением (ККГД) при комнатной температуре. Средний размер зерна в состоянии после ККГД составлял  $d \sim 80$  нм ( $d < d_1$ ).

Измерение микродеформаций ( $\Delta\varepsilon$ , %) проводилось методом рентгеноструктурного анализа в соответствии с обычной процедурой [29]. В результате исследований была получена зависимость  $\Delta\varepsilon$  от температуры 30-минутного отжига в интервале температур от 293 до 673 К (см. табл. 2, рис. 1). (Максимальная температура отжига в эксперименте соответствовала температуре начала рекристаллизации).

Используя соотношение  $\sigma_{elast} = E \cdot \Delta\varepsilon$  (где  $E$  – модуль упругости меди), можно определить зависимость величины упругих напряжений ( $\sigma_{elast}$ ) от температуры отжига. Из проведенных

оценок следует, что увеличение температуры от 293 до 623 К приводит к уменьшению  $\sigma_{\text{elast}}$  от 120 до 24 МПа.

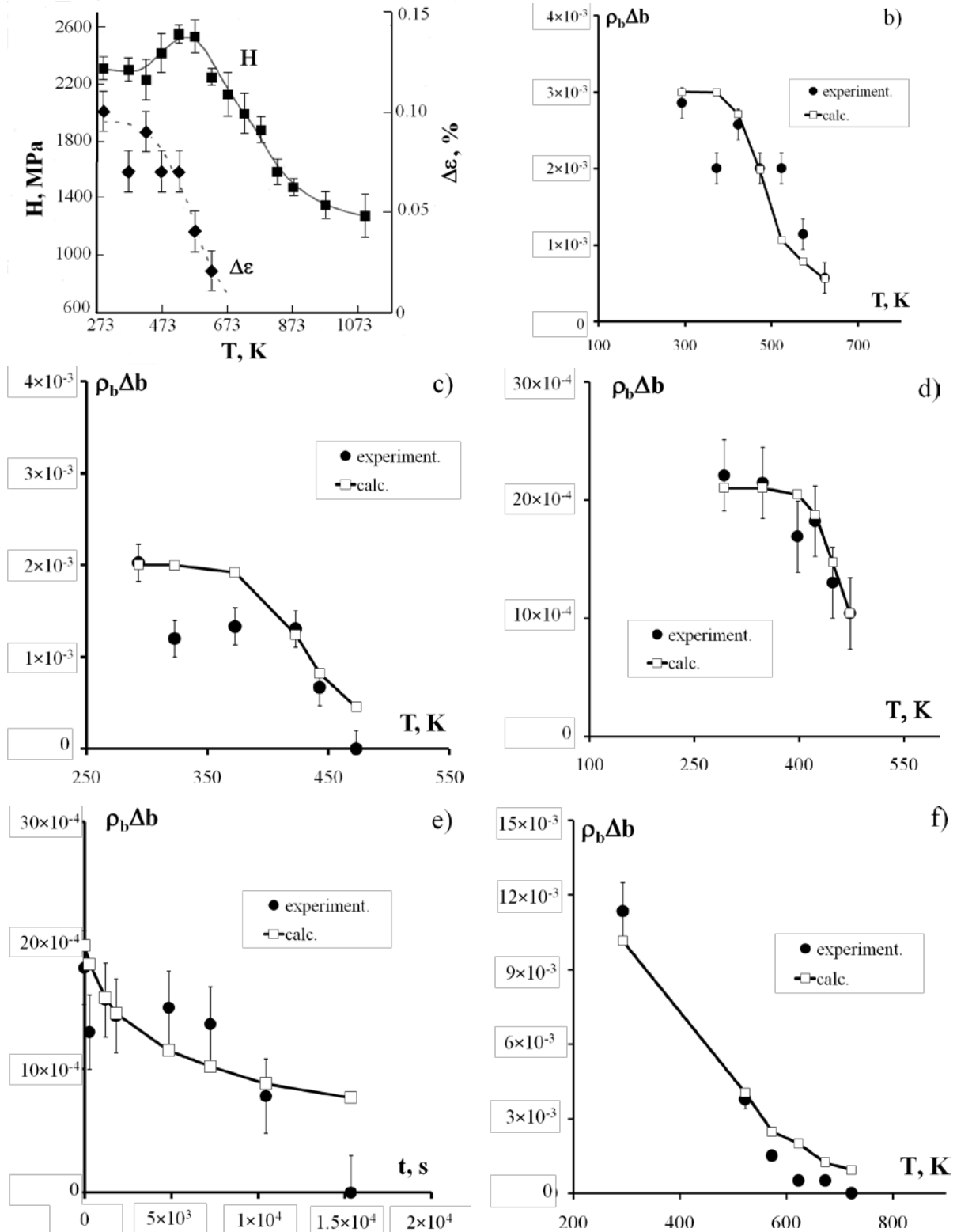


Рис. 1. Зависимость микротвердости ( $H$ ) и величины микроискажений ( $\epsilon_{\text{ср.кв}}$ ) от температуры отжига УМЗ сплава  $\text{Cu}+0.5\%\text{Al}_2\text{O}_3$  [28] (рис. 1а), а также результаты численного расчета зависимости плотности ДОН от температуры (б, в, г, д) и времени отжига УМЗ металлов: б - сплав  $\text{Cu}-0.5\%\text{Al}_2\text{O}_3$  [28]; в - УМЗ Ni [6], г, д – УМЗ Ti [30], е - УМЗ Ti [31, 32].

Предполагая, что в УМЗ меди процесс возврата контролируется кинетикой делокализации ДОН ( $d < d_1$ ), можно связать величину  $\sigma_{\text{elast}}$  с плотностью ДОН с помощью простого соотношения:  $\rho_b \Delta b = \varphi_1 \sigma_{\text{elast}} / G$  (см. (13)). Оценки показывают, что при увеличении температуры 30-минутного отжига от 293 К до 623 К плотность ДОН ( $\rho_b \Delta b$ ) уменьшается от исходного значения  $2.9 \cdot 10^{-3}$  до  $5.7 \cdot 10^{-4}$ .

В соответствии с (2)-(3) такое изменение плотности ДОН соответствует повышению  $Q_b^*$  от 7.8 кТ<sub>m</sub> до 9.2 кТ<sub>m</sub> и увеличению множителя  $D_{b0}^*$  от  $1.69 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с до  $8.83 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с. Необходимые для расчета параметры приведены в табл.1.

Решим теперь «обратную» задачу. Для этого воспользуемся приведенной выше теоретической зависимостью (19) плотности ДОН от времени и температуры отжига. Принимая  $\rho_{b0} \Delta b = 3 \cdot 10^{-3}$ ,  $b = 2.56 \cdot 10^{-10}$  м,  $A_1 = 10$  определим зависимость плотности ДОН от температуры отжига при  $t = 30$  min и сопоставим ее с экспериментальной. Результаты такого сопоставления представлены на рис.1а.

#### б) Ультрамелкозернистый никель

1. В [6] описаны результаты исследований УМЗ Ni ( $d \sim 0.13$  мкм  $< d_1$ ), структура которого сформирована методом равноканально-углового прессования (РКУП). Отжики проводились в дорекристаллизационном интервале температур. Результаты измерений величины микродеформаций  $\Delta \epsilon$  представлены в табл. 2.

Таблица 2.

#### Зависимость величины микродеформаций $\Delta \epsilon$ , % от температуры отжига в УМЗ никеле [6]

Т, К	293	323	373	423	443
$\Delta \epsilon$ , %	0.076	0.045	0.05	0.049	0.025

Используя описанную выше процедуру получим, что при отжиге УМЗ Ni величина  $\sigma_{\text{elast}}$  уменьшается от 156 до 51 МПа, что соответствует снижению плотности ДОН от  $2.0 \cdot 10^{-3}$  до  $6.7 \cdot 10^{-4}$ . Такое изменение плотности ДОН соответствует (см. (2)-(3)) повышению  $Q_b^*$  от 7.9 кТ<sub>m</sub> до 8.7 кТ<sub>m</sub> и повышению  $D_{b0}^*$  от  $1.53 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с до  $5.28 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с. Необходимые для расчета параметры материала приведены в табл. 1.

На рис. 1б представлены экспериментальные данные и результаты численного расчета зависимости плотности ДОН от температуры отжига УМЗ Ni. Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными показывает их удовлетворительное соответствие.

2. В работе [30] описаны результаты исследований влияния времени и температуры изотермической выдержки на внутренние напряжения в УМЗ никеле ( $d \sim 70-100$  нм  $< d_1$ ), структура которого сформирована методом РКУП.

Обобщение данных показывает, что увеличение температуры 30-минутного отжига от 348 К до 473 К приводит к уменьшению  $\sigma_{\text{elast}}$  от 170 до 80 МПа, что соответствует уменьшению плотности  $\rho_b \Delta b$  от  $2.21 \cdot 10^{-3}$  до  $1.04 \cdot 10^{-3}$  (см. (13)). Такое изменение плотности ДОН соответствует (см. (2)-(3)) повышению  $Q_b^*$  от 7.0 кТ<sub>m</sub> до 7.6 кТ<sub>m</sub> и повышению  $D_{b0}^*$  от  $3.48 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с до  $4.74 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с.

Следует также отметить, что за время  $t \sim 260$  мин при  $T = 448$  К происходит уменьшение  $\sigma_{\text{elast}}$  от  $\sim 140$  МПа до нуля, что соответствует уменьшению плотности ДОН от  $1.82 \cdot 10^{-3}$  до нуля и, соответственно, увеличению  $Q_b^*$  от 7.2 кТ<sub>m</sub> до 8.1 кТ<sub>m</sub> и увеличению предэкспоненциального множителя  $D_{b0}^*$  от  $3.90 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с до  $5.28 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с.



Результаты расчетов представлены на рис. 1в, г. Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными показывает их хорошее соответствие.

в) *Ультрамелкозернистый титан*

В [31, 32] описаны результаты исследований влияния отжигов на уровень внутренних напряжений в титане ВТ1-0, УМЗ структура ( $d=0.3 \text{ мкм} < d_1$ ) которого была сформирована комбинацией радиально-сдвиговой, продольной и поперечно-винтовой прокаток. Отжиги образцов проводились в интервале температур до температуры рекристаллизации (723 К), определенной по результатам исследований структуры и измерений твердости [31, 32]. Рассчитанные значения  $\sigma_{\text{elast}}$  представлены в табл. 3.

Обобщение представленных данных показывает, что увеличение температуры отжига УМЗ титана от 293 К до 673 К приводит к уменьшению  $\sigma_{\text{elast}}/E$  от  $4.5 \cdot 10^{-3}$  до  $2.0 \cdot 10^{-4}$ , что соответствует уменьшению  $\sigma_{\text{elast}}$  от 495 до 22 МПа. Величина  $\sigma_{\text{elast}}$  после отжига при 723 К равна нулю [31, 32]. Такое изменение  $\sigma_{\text{elast}}$  в соответствии с понижением плотности  $\rho_b \Delta b$  от  $1.14 \cdot 10^{-2}$  до  $5.05 \cdot 10^{-4}$  (см. уравнение (13)), и, как следствие, повышению  $D_{b0}^*$  от  $1.75 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$  до  $6.18 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$  (см. уравнение (3)) и  $Q_b^*$  от 3.8 кТм до 7.8 кТм (см. уравнение (2)).

На рис. 1д представлены результаты численного расчета зависимости плотности ДОН от температуры отжига УМЗ титана. Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными показывает их удовлетворительное соответствие.

Таблица 3.

**Зависимость внутренних напряжений от температуры отжига УМЗ титана [31, 32]**

T, K	293	523	573	623	673	723	773
$\sigma_{\text{elast}}/E$	$450 \cdot 10^{-4}$	$15 \cdot 10^{-4}$	$14 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	0

**Обсуждение результатов.** Как видно из изложенной выше модели и приведенных результатов, энергия активации и коэффициент диффузии УМЗ металлов и сплавов оказываются не постоянными, а зависят от времени и температуры отжига. В процессе изотермической выдержки при комнатной или повышенной температуре имеет место повышение энергии активации зернограничной диффузии от значений, характерных для неравновесного состояния  $Q_b^* \sim 5 \div 6 \text{ кТм}$  [2], до значений, характерных для равновесных границ зерен  $Q_b \sim 9 \div 10 \text{ кТм}$  [17]. С этим, на наш взгляд, связана некорректность использования стандартной процедуры определения параметров диффузионных свойств границ зерен в УМЗ материалах основанная на построении зависимости  $\ln D_b^* - T_m/T$ , при использовании которой неявно предполагается, что значения  $D_{b0}^*$  и  $Q_b^*$  остаются постоянными.

Следует также обратить внимание, что кинетика процессов возврата в УМЗ материалах с малым ( $d < d_1$ ) и крупным ( $d > d_1$ ) зерном, а также при «низкой» ( $T < T_1$ ) и «высокой» температуре ( $T > T_1$ ) может заметно отличаться – в частности при  $d > d_1$  эта кинетика оказывается существенно зависящей от размера зерна.

Указанная нестабильность диффузионных свойств границ зерен УМЗ материалов, обусловленная их исходной неравновесностью, должна приниматься во внимание и при прогнозе свойств УМЗ материалов, и при решении методических задач, связанных с оценкой диффузионных свойств их границ зерен.

**Выводы.** Проведен теоретический анализ особенностей изменения диффузионных свойств неравновесных границ зерен УМЗ материалов в процессе возврата. Показано, что интенсивность возврата диффузионных свойств границ зерен зависит от размера зерна и в УМЗ материалах оказывается гораздо выше, чем в крупнозернистых.

**Примечания:**

1. Segal V.M. *Fundamentals and Engineering of Severe Plastic Deformation* / V.M. Segal, I.J. Beyerlein, C.N. Tome, V.N. Chuvil'deev, V.I. Kopylov. New York: Nova Science Publishers, 2010, 549 p.
2. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. М.: Физматлит, 2004. 304 с.
3. Сегал В.М. Процессы пластического структурообразования металлов / В.М. Сегал, В.И. Резников, В.И. Копылов, Д.А. Павлик, В.Ф. Малышев. Минск: Наука и техника, 1994, 232 с.
4. Valiev R.Z. Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement / R.Z. Valiev, T.G. Langdon // *Progress in Materials Science*. 2006. V. 51. P. 881.
5. Грабовецкая Г.П. Зернограничная диффузия и ползучесть субмикроструктурных металлических материалов, полученных методами интенсивной пластической деформации. 01.04.07. Автореф. дисс. к.т.н. Томск: Томский государственный университет, 2008. 32 с.
6. Колобов Ю.Р. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурированных материалов / Ю.Р. Колобов, Р.З. Валиев, Г.П. Грабовецкая, А.П. Жилиев, Е.Ф. Дударев, К.В. Иванов, М.Б. Иванов, О.А. Кашин, Е.В. Найденкин. Новосибирск: Наука, 2001, 232 с.
7. Chuvil'deev V.N. Non-equilibrium grain boundaries. Theory and its applications for describing nano- and microcrystalline materials processed by ECAP / V.N. Chuvil'deev, V.I. Kopylov, W. Zeiger // *Annales de Chimie: Science des Materiaux*. 2002. V. 27. Iss. 3. P. 55-64.
8. Kolobov Yu.R. Grain boundary diffusion characteristics of nanostructured nickel / Yu.R. Kolobov, G.P. Grabovetskaya, M.B. Ivanov, A.P. Zhilyaev, R.Z. Valiev // *Scripta Materialia*. 2001. V.44. Iss. 6. P. 873-878.
9. Колобов Ю.Р. Влияние состояния границ и размера зерен на механизмы ползучести субмикроструктурного никеля / Ю.Р. Колобов, Г.П. Грабовецкая, К.В. Иванов, Н.В. Гирсова // *Физика металлов и металловедение*. 2001. Т. 91. №5. С. 107-112.
10. Чувильдеев В.Н. Микромеханизмы зернограничного возврата при отжиге после деформации. Часть I. Возврат диффузионных свойств границ зерен / В.Н. Чувильдеев, О.Э. Пирожникова, А.В. Петряев // *Физика металлов и металловедение*. 2001. Т. 92. №6. С. 14-19.
11. Петряев А.В. Микромеханизмы зернограничного возврата при отжиге после деформации. Часть II. Возврат предела текучести в мелкозернистых материалах / А.В. Петряев, В.Н. Чувильдеев // *Физика металлов и металловедение*. 2001. Т. 92. №6. С. 20-26.
12. Amouyal Y. Short-circuit diffusion in an ultrafine-grained copper-zirconium alloy processed by equal channel angular pressing / Y. Amouyal, S.V. Divinski, Y. Estrin, E. Rabkin // *Acta Materialia*. 2007. V. 55. Iss. 17. P. 5968-5979.
13. Fujita T. Using grain boundary engineering to evaluate the diffusion characteristics in ultrafine-grained Al-Mg and Al-Zn alloys / T. Fujita, Z. Horita, T.G. Langdon // *Materials Science and Engineering A*. 2004. V. 371. Iss. 1-2. P. 241-250.
14. Amouyal Y. Grain boundary diffusion and recrystallization in ultrafine grain copper produced by equal channel angular pressing / Y. Amouyal, S.V. Divinski, L. Klinger, E. Rabkin // *Acta Materialia*. 2008. V. 56. Iss. 19. P. 5500-5511.
15. Molodova X. Thermal stability of ECAP processed pure copper / X. Molodova, G. Gottstein, M. Winning, R.J. Hellmig // *Materials Science and Engineering A*. 2007. V. 460-461. P. 204-213.
16. Kim H.-K. Activation energies for the grain growth of an AZ31 Mg alloy after equal channel angular pressing // *Journal of Materials Science*. 2004. V. 39. Iss. 23. P. 7107-7109.
17. Фрост Г.Дж. Карты механизмов деформации / Г.Дж. Фрост, М.Ф. Эшби. Челябинск: Металлургия, 1989. 328 с.
18. Чувильдеев В.Н. Микромеханизм деформационно-стимулированной зернограничной самодиффузии. Часть 3. Влияние потоков решеточных дислокаций на диффузионные свойства границ зерен / В.Н. Чувильдеев, О.Э. Пирожникова // *Физика металлов и металловедение*. 1996. Т. 82. №1. С. 106-115.
19. Чувильдеев В.Н. Условия применимости соотношения Холла-Петча для нано- и микрокристаллических материалов, полученных методом интенсивной пластической деформации / В.Н. Чувильдеев, А.В. Нохрин, В.И. Копылов, Ю.Г. Лопатин, Н.В. Мелехин, О.Э. Пирожникова, М.М. Мышляев, Н.В. Сахаров // *Деформация и разрушение материалов*. 2009. №12. С. 17-25.
20. Чувильдеев В.Н. Модель деформационного упрочнения при сверхпластичности нано- и микрокристаллических сплавов, полученных методами интенсивного пластического деформирования / В.Н. Чувильдеев, О.Э. Пирожникова, А.В. Нохрин, М.Ю. Грязнов, Ю.Г. Лопатин, В.И. Копылов, Н.В. Мелехин, Н.В. Сахаров, М.М. Мышляев // *Деформация и разрушение материалов*. 2011. №1. С. 17-25.
21. Чувильдеев В.Н. Эффект одновременного повышения прочности и пластичности при комнатной температуре в нано- и микрокристаллических металлах, полученных методами интенсивного пластического деформирования. Модель расчета предельной прочности и пластичности

при комнатной температуре. Часть 1 / В.Н. Чувильдеев, А.В. Нохрин, В.И. Копылов, М.Ю. Грязнов, О.Э. Пирожникова, Ю.Г. Лопатин // *Материаловедение*. 2010. №12. С. 2-10.

22. Нохрин А.В. Термическая стабильность структуры микрокристаллических металлов, полученных методом равноканального углового прессования / А.В. Нохрин, В.Н. Чувильдеев, Е.С. Смирнова, И.М. Макаров, Ю.Г. Лопатин, В.И. Копылов // *Металлы*. 2004. №2. С. 41-55.

23. Kwiecinski J. Kinetics of recovery on grain boundaries in polycrystalline aluminium / J. Kwiecinski, J. Wyrzykowski. // *Acta Metallurgica*. 1989. V. 37. Iss. 5. P. 1503-1507.

24. Kwiecinski J. Investigation of grain boundary self-diffusion at low temperatures in polycrystalline aluminium means of the dislocation spreading method / J. Kwiecinski, J. Wyrzykowski. // *Acta Metallurgica*. 1991. V. 39. Iss. 8. P. 1953-1958.

25. Swiatnicki W.A. Investigation of grain boundary diffusion in polycrystals by means of extrinsic grain boundary dislocations spreading rate / W.A. Swiatnicki, W. Lojkowski, M.W. Grabski // *Acta Metallurgica*. 1986. V. 34. Iss. 4. P. 599-605.

26. Lojkowski W. Kinetics of the spreading of extrinsic grain boundary dislocation of random grain boundaries in metals / W. Lojkowski, M.N. Grabski. // *Metals and Materials Science*. 1981. V. 1. P. 329-333.

27. Varin R.A. On the relation between temperature and time of the spreading of extrinsic grain boundary. Dislocations and the grain boundary energy in an austenitic steel // *Z. Metallkunde*. 1982. V. 10. P. 654-658.

28. Амирханов Н.М. Механические свойства нанокompозита Cu+0.5%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, полученного интенсивной пластической деформацией / Н.М. Амирханов, Р.К. Исламгалиев, Р.З. Валиев // *Физика металлов и материаловедение*. 2001. Т. 92. №5. С. 99-107.

29. Горелик С.С. Рентгенографический и электроннографический анализ / С.С. Горелик, С.П. Расторгуев, Ю.А. Скаков. М.: *Металлургия*, 2002, 576 с.

30. Klemm R. / R. Klemm, E. Thiele, C. Holste, J. Eckert, N. Schell. Thermal stability of grain structure and defects in submicrystalline and nanocrystalline nickel // *Scripta Materialia*. 2002. V. 46. Iss. 9. P. 685-690.

31. Колобов Ю.Р. Технологии формирования структуры и свойств титановых сплавов для медицинских имплантатов с биоактивными покрытиями // *Российские нанотехнологии*. 2009. Т. 4. №11-12. С. 69-81.

32. Голосов Е.В. Закономерности и механизмы диффузионно-контролируемых процессов в наноструктурированных материалах на основе титана и ниобия. 01.04.07. Автореф. дисс. к.ф.-м.н. Белгород: БГУ, 2009, 24 с.

#### References:

1. Segal V.M. *Fundamentals and Engineering of Severe Plastic Deformation* / V.M. Segal, I.J. Beyerlein, C.N. Tome, V.N. Chuvil'deev, V.I. Kopylov. New York: Nova Science Publishers, 2010, 549 p.

2. Chuvil'deev V.N. *Neravnovesnye granitsy zeren v metallakh. Teoriya i prilozheniya*. М.: Fizmatlit, 2004. 304 s. (In rus.)

3. Segal V.M. *Protsessy plasticheskogo strukturoobrazovaniya metallov* / V.M. Segal, V.I. Reznikov, V.I. Kopylov, D.A. Pavlik, V.F. Malyshev. Minsk: Nauka i tekhnika, 1994, 232 s. (In rus.)

4. Valiev R.Z. Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement / R.Z. Valiev, T.G. Langdon // *Progress in Materials Science*. 2006. V. 51. P. 881.

5. Grabovetskaya G.P. *Zernogranichnaya diffuziya i polzuchest' submikrokristallicheskih metallicheskih materialov, poluchennykh metodami intensivnoi plasticheskoi deformatsii*. 01.04.07. Avtoref. diss. k.t.n. Tomsk: Tomskii gosudarstvennyi universitet, 2008. 32 s. (In rus.)

6. Kolobov Yu.R. *Zernogranichnaya diffuziya i svoistva nanostrukturirovannykh materialov* / Yu.R. Kolobov, R.Z. Valiev, G.P. Grabovetskaya, A.P. Zhilyaev, E.F. Dudarev, K.V. Ivanov, M.B. Ivanov, O.A. Kashin, E.V. Naidenkin. Novosibirsk: Nauka, 2001. 232 s. (In rus.)

7. Chuvil'deev V.N. Non-equilibrium grain boundaries. Theory and its applications for describing nano- and microcrystalline materials processed by ECAP / V.N. Chuvil'deev, V.I. Kopylov, W. Zeiger // *Annales de Chimie: Science des Materiaux*. 2002. V. 27. Iss. 3. P. 55-64.

8. Kolobov Yu.R. Grain boundary diffusion characteristics of nanostructured nickel / Yu.R. Kolobov, G.P. Grabovetskaya, M.B. Ivanov, A.P. Zhilyaev, R.Z. Valiev // *Scripta Materialia*. 2001. V.44. Iss. 6. P. 873-878.

9. Kolobov Yu.R. *Vliyanie sostoyaniya granits i razmera zeren na mekhanizmy polzuchesti submikrokristallicheskogo nikelya* / Yu.R. Kolobov, G.P. Grabovetskaya, K.V. Ivanov, N.V. Girsova // *Fizika metallov i metallovedenie*. 2001. Т. 91. №5. S. 107-112. (In rus.)

10. Chuvil'deev V.N. *Mikromekhanizmy zernogranichnogo vozvrata pri ozhighe posle deformatsii. Chast' I. Vozvrat diffuzionnykh svoistv granits zeren* / V.N. Chuvil'deev, O.E. Pirozhnikova, A.V. Petryaev // *Fizika metallov i metallovedenie*. 2001. Т. 92. №6. S. 14-19. (In rus.)

11. Petryaev A.V. Mikromekhanizmy zernogranichnogo vozvrata pri ozhighe posle deformatsii. Chast' II. Vozvrat predela tekuchesti v melkozernistykh materialakh / A.V. Petryaev, V.N. Chuvil'deev // Fizika metallov i metallovedenie. 2001. T. 92. №6. S. 20-26. (In rus.)
12. Amouyal Y. Short-circuit diffusion in an ultrafine-grained copper-zirconium alloy processed by equal channel angular pressing / Y. Amouyal, S.V. Divinski, Y. Estrin, E. Rabkin // Acta Materialia. 2007. V. 55. Iss. 17. P. 5968-5979.
13. Fujita T. Using grain boundary engineering to evaluate the diffusion characteristics in ultrafine-grained Al-Mg and Al-Zn alloys / T. Fujita, Z. Horita, T.G. Langdon // Materials Science and Engineering A. 2004. V. 371. Iss. 1-2. P. 241-250.
14. Amouyal Y. Grain boundary diffusion and recrystallization in ultrafine grain copper produced by equal channel angular pressing / Y. Amouyal, S.V. Divinski, L. Klinger, E. Rabkin // Acta Materialia. 2008. V. 56. Iss. 19. P. 5500-551.
15. Molodova X. Thermal stability of ECAP processed pure copper / X. Molodova, G. Gottstein, M. Winning, R.J. Hellmig // Materials Science and Engineering A. 2007. V. 460-461. P. 204-213.
16. Kim H.-K. Activation energies for the grain growth of an AZ31 Mg alloy after equal channel angular pressing // Journal of Materials Science. 2004. V. 39. Iss. 23. P. 7107-7109.
17. Frost G.Dzh. Karty mekhanizmov deformatsii / G.Dzh. Frost, M.F. Eshbi. Chelyabinsk: Metallurgiya, 1989. 328 s. (In rus.)
18. Chuvil'deev V.N. Mikromekhanizm deformatsionno-stimulirovannoi zernogranichnoi samodiffuzii. Chast' 3. Vliyaniye potokov reshetochnykh dislokatsii na diffuzionnye svoistva granits zeren / V.N. Chuvil'deev, O.E. Pirozhnikova // Fizika metallov i metallovedenie. 1996. T. 82. №1. S. 106-115. (In rus.)
19. Chuvil'deev V.N. Usloviya primenimosti sootnosheniya Kholla-Petcha dlya nano- i mikrokristallicheskiykh materialov, poluchennykh metodom intensivnoi plasticheskoi deformatsii / V.N. Chuvil'deev, A.V. Nokhrin, V.I. Kopylov, Yu.G. Lopatin, N.V. Melekhin, O.E. Pirozhnikova, M.M. Myshlyaev, N.V. Sakharov // Deformatsiya i razrusheniye materialov. 2009. №12. S. 17-25. (In rus.)
20. Chuvil'deev V.N. Model' deformatsionnogo uprochneniya pri sverkhplastichnosti nano- i mikrokristallicheskiykh splavov, poluchennykh metodami intensivnogo plasticheskogo deformirovaniya / V.N. Chuvil'deev, O.E. Pirozhnikova, A.V. Nokhrin, M.Yu. Gryaznov, Yu.G. Lopatin, V.I. Kopylov, N.V. Melekhin, N.V. Sakharov, M.M. Myshlyaev // Deformatsiya i razrusheniye materialov. 2011. №1. S. 17-25. (In rus.)
21. Chuvil'deev V.N. Effekt odnovremennogo povysheniya prochnosti i plastichnosti pri komnatnoi temperature v nano- i mikrokristallicheskiykh metallakh, poluchennykh metodami intensivnogo plasticheskogo deformirovaniya. Model' rascheta predel'noi prochnosti i plastichnosti pri komnatnoi temperature. Chast' 1 / V.N. Chuvil'deev, A.V. Nokhrin, V.I. Kopylov, M.Yu. Gryaznov, O.E. Pirozhnikova, Yu.G. Lopatin // Metallovedenie. 2010. №12. S. 2-10. (In rus.)
22. Nokhrin A.V. Termicheskaya stabil'nost' struktury mikrokristallicheskiykh metallov, poluchennykh metodom ravnokanal'nogo uglovogo pressovaniya / A.V. Nokhrin, V.N. Chuvil'deev, E.S. Smirnova, I.M. Makarov, Yu.G. Lopatin, V.I. Kopylov // Metally. 2004. №2. S. 41-55. (In rus.)
23. Kwiecinski J. Kinetics of recovery on grain boundaries in polycrystalline aluminium / J. Kwiecinski, J. Wyrzykowski. // Acta Metallurgica. 1989. V. 37. Iss. 5. P. 1503-1507.
24. Kwiecinski J. Investigation of grain boundary self-diffusion at low temperatures in polycrystalline aluminium means of the dislocation spreading method / J. Kwiecinski, J. Wyrzykowski. // Acta Metallurgica. 1991. V. 39. Iss. 8. P. 1953-1958.
25. Swiatnicki W.A. Investigation of grain boundary diffusion in polycrystals by means of extrinsic grain boundary dislocations spreading rate / W.A. Swiatnicki, W. Lojkowski, M.W. Grabski // Acta Metallurgica. 1986. V. 34. Iss. 4. P. 599-605.
26. Lojkowski W. Kinetics of the spreading of extrinsic grain boundary dislocation of random grain boundaries in metals / W. Lojkowski, M.N. Grabski. // Metals and Materials Science. 1981. V. 1. P. 329-333.
27. Varin R.A. On the relation between temperature and time of the spreading of extrinsic grain boundary. Dislocations and the grain boundary energy in an austenitic steel // Z.Metallkunde. 1982. V. 10. P. 654-658. (In rus.)
28. Amirkhanov N.M. Mekhanicheskie svoistva nanokompozita Cu+0.5%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, poluchennogo intensivnoi plasticheskoi deformatsiei / N.M. Amirkhanov, R.K. Islamgaliev, R.Z. Valiev // Fizika metallov i metallovedenie. 2001. T. 92. №5. S. 99-107. (In rus.)
29. Gorelik S.S. Rentgenograficheskii i elektronograficheskii analiz / S.S. Gorelik, S.P. Rastorguev, Yu.A. Skakov. M.: Metallurgiya, 2002, 576 s. (In rus.)
30. Klemm R. / R. Klemm, E. Thiele, C. Holste, J. Eckert, N. Schell. Thermal stability of grain structure and defects in submicrystalline and nanocrystalline nickel // Scripta Materialia. 2002. V. 46. Iss. 9. P. 685-690.

31. Kolobov Yu.R. Tekhnologii formirovaniya struktury i svoistv titanovykh splavov dlya meditsinskikh implantatov s bioaktivnymi pokrytiyami // Rossiiskie nanotekhnologii. 2009. T. 4. №11-12. S. 69-81. (In rus.)

32. Golosov E.V. Zakonomernosti i mekhanizmy diffuzionno-kontroliruemykh protsessov v nanostrukturirovannykh materialakh na osnove titana i niobiya. 01.04.07. Avtoref. diss. k.f.-m.n. Belgorod: BGU, 2009, 24 s. (In rus.)

УДК 539.4; 669.3

**Теоретический анализ процессов возврата диффузионных свойств  
неравновесных границ зерен при отжиге  
ультрамелкозернистых металлов и сплавов**

<sup>1</sup> Владимир Николаевич Чувильдеев

<sup>2</sup> Владимир Ильич Копылов

<sup>3</sup> Алексей Владимирович Нохрин

<sup>4</sup> Ольга Эдуардовна Пирожникова

<sup>1, 3, 4</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Россия  
603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, корп. 3

Доктор физико-математических наук, профессор

E-mail: [chuvildeev@nifti.unn.ru](mailto:chuvildeev@nifti.unn.ru)

<sup>2</sup> Физико-технический институт Национальной Академии Наук Беларуси, Беларусь  
220141, г. Минск, ул. Купревича, 10

E-mail: [kopylov.ecap@gmail.com](mailto:kopylov.ecap@gmail.com)

<sup>3</sup> Кандидат физико-математических наук

E-mail: [nokhrin@nifti.unn.ru](mailto:nokhrin@nifti.unn.ru)

<sup>4</sup> Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник

E-mail: [opiro@mail.ru](mailto:opiro@mail.ru)

**Аннотация.** В работе проведен теоретический анализ особенной процесса возврата диффузионных свойств при отжиге ультрамелкозернистых (УМЗ) материалов, полученных методами интенсивного пластического деформирования (ИПД). Показано, что энергия активации и коэффициент зернограницной диффузии УМЗ материалов зависят от плотности накопленных в границах дефектов, попавших в границы зерен при ИПД. Во время отжига происходит диффузионное перераспределение дефектов в границах зерен УМЗ материалов, что приводит к изменению их диффузионных свойств. Показано, что интенсивность возврата диффузионных свойств границ зерен зависит от размера зерна и в УМЗ материалах она оказывается гораздо выше, чем в более крупнозернистых материалах.

**Ключевые слова:** Ультрамелкозернистые металлы; неравновесные границы зерен; возврат; диффузия.