

СКИБА Николай Васильевич

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОД ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ
И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ЗАРОЖДЕНИЕ И РОСТ ТРЕЩИН В
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

Специальности: 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт проблем машиноведения Российской академии наук

Научный консультант: **Овидько Илья Анатольевич**
доктор физико-математических наук
зав. лаб. механики наноматериалов и теории
дефектов ФГБУН Институт проблем машинове-
дения Российской академии наук

Официальные оппоненты: **Гольдштейн Роберт Вениаминович**
доктор физико-математических наук, чл.-корр.
РАН, зав. лаб. механики прочности и разруше-
ния материалов и конструкций ФГБУН Инсти-
тут проблем механики им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук

Малыгин Геннадий Алексеевич
доктор физико-математических наук, в.н.с.
ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф.
Иоффе Российской академии наук

Лурье Сергей Альбертович
доктор технических наук, профессор, зав. лаб.
неклассических моделей механики композитных
материалов и конструкций ФГБУН Институт при-
кладной механики Российской академии наук

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Санкт-Петербургский Академический универ-
ситет – научно-образовательный центр нано-
технологий РАН

Защита состоится 16 октября 2014 года в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 002.075.01 в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт проблем машиноведения Российской академии наук по адресу: 199178, Санкт-Петербург, Большой пр., В.О., д. 61.

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт проблем машиноведения Российской академии наук.

Автореферат разослан “___” августа 2014

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор технических наук

 В.В. Дубаренко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В настоящее время изучение пластического поведения наноструктурных твердых тел является одним из важнейших и быстро развивающихся направлений механики деформируемого твердого тела и физики конденсированного состояния. Наноструктурные твердые тела обладают уникальными физическими, механическими и химическими свойствами и представляют повышенный интерес, как для фундаментальных, так и для прикладных исследований. Например, прочность, твердость и износостойкость нанокристаллических металлов и керамик в несколько раз выше соответствующих характеристик обычных крупнозернистых аналогов того же химического состава. Вместе с тем, нанокристаллические твердые тела в подавляющем числе случаев характеризуются низкими показателями пластичности и трещиностойкости, которые крайне нежелательны для их практических приложений. Повышение пластичности и трещиностойкости наноматериалов является важной задачей, решение которой может значительно расширить область их прикладного использования.

Экспериментальные исследования структуры нанокристаллических материалов показали, что из-за малого размера зерен значительную долю объема этих материалов (иногда десятки процентов) занимают межзеренные границы и их тройные стыки. Вследствие особенностей структуры, характеризующейся высокой объемной долей межзеренной фазы и малым размером зерен, границы зерен в нанокристаллических материалах выступают в роли эффективных препятствий для скольжения решеточных дислокаций – доминирующего механизма деформации в крупнозернистых поликристаллах. Так, например, низкая трещиностойкость нанокристаллических керамик и металлов связывается с подавлением обычных микромеханизмов торможения трещин (прежде всего, торможения трещин за счет их затупления при испускании дислокаций из вершин трещин). В тоже время, особенности структуры нанокристаллических материалов обеспечивает действие специфических механизмов деформации, действие которых в крупнозернистых материалах не наблюдалось или было незначительным.

Анализ экспериментальных исследований этих специфических механизмов деформации позволяет сформулировать основное качественное отличие непластичных нанокристаллических материалов от наноматериалов, проявляющих повышенную пластичность и трещиностойкость. Дело в том, что каждый нанокристаллический образец состоит из множества структурных элементов – зерен разных размеров, границ зерен различного типа и разориентировок, а также тройных стыков границ зерен. В такой ситуации, в нанокристаллическом образце при механическом нагружении одновременно действуют несколько механизмов пластической деформации. В общем случае в соседних зернах разных размеров и прилегающих к ним границам зерен доминируют разные механизмы пластической деформации. В малопластичных нанокристаллических материалах разные механизмы деформации действуют независимо друг от друга, что быстро приводит к существенной неоднород-

ности пластической деформации, которая в свою очередь способствует зарождению и развитию трещин. В то же время, в нанокристаллических материалах, характеризующихся пластичностью и сверхпластичностью, разные механизмы пластической деформации эффективно взаимодействуют между собой. Происходят интенсивные переходы между разными механизмами деформации, которые «сглаживают» неоднородности пластической деформации. Это обеспечивает высокую пластичность и трещиностойкость нанокристаллических материалов в условиях эффективного взаимодействия различных мод пластической деформации.

Следует отметить, что в настоящее время накоплен достаточно большой объем экспериментальных данных, которые подтверждают действие специфических мод пластической деформации в нанокристаллических твердых телах. Однако, вследствие существующих ограничений в разрешающей способности применяемого оборудования и сложности расшифровки получаемых экспериментальных результатов, современные экспериментальные методы зачастую не позволяют идентифицировать вклад отдельных мод пластической деформации в пластичность нанокристаллических материалов, а также роль взаимодействия этих мод в процессах пластической деформации наноструктур. Во многих случаях не удастся экспериментально определить дефектные структуры и их трансформации, ответственные за действие механизмов пластической деформации в нанокристаллических материалах. Помимо этого, вследствие новизны проблемы, теория поведения нанокристаллических материалов при механическом нагружении слаба развита. До последнего времени наибольшее внимание уделялось построению упругих моделей дефектов в наноструктурах в рамках классической теории упругости [Гуткин, Овидько, (Янус, Санкт-Петербург, 2001) 180с], континуальной теории [Lurie, Kalamkarov, *Int. J. Sol. Struct.* **43** (2006) 91], нелокальной [Povstenko, *J. Phys. D.: Appl. Phys.* **28** (1995) 105] и градиентной [Gutkin, Aifantis, *Scr. Mater.* **40** (1999) 559] теорий упругости. Приложение же этих моделей к построению адекватной теории поведения нанокристаллических твердых тел при пластической деформации находится на стадии становления. Как следствие, построение теоретических моделей, описывающих взаимодействие мод пластической деформации и их влияние на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел – предмет настоящей диссертационной работы – является исключительно важным как для понимания фундаментальных основ особенностей пластической деформации нанокристаллических твердых тел, так и для развития высоких технологий получения нанокристаллических материалов с одновременно сверхвысокими прочностными характеристиками и функциональной пластичностью. Это обуславливает актуальность предлагаемой диссертационной работы.

Цель работы состоит в построении теоретических моделей, которые достоверно описывают взаимодействие между различными модами пластической деформации и их влияние на трещиностойкость деформируемых нанокристаллических твердых тел.

Для достижения этой цели были поставлены и решены следующие **основные задачи**:

- Построение модели совместного действия межзеренного скольжения и ротационной деформации, определение условий перехода от межзеренного скольжения к вращению зерен в нанокристаллических твердых телах, разработка механизма аккомодации межзеренного скольжения за счет испускания границами зерен решеточных дислокаций в нанокристаллических твердых телах; построение моделей механизмов упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических твердых телах при сверхпластической деформации, построение теоретической зависимости напряжения течения от степени пластической деформации.
- Построение моделей зарождения деформационных нанодвойников на границах зерен и вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах, анализ влияния зарождения и эволюции нанодвойников вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических материалов.
- Построение моделей механизмов релаксации напряжений в нанокристаллических пленках и подложках за счет действия межзеренного скольжения и диффузионного массопереноса по границам зерен.
- Построение моделей зарождения наноскопических зерен и их цепочек на границах зерен и вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах и изучение влияния образования и эволюции нанозерен и их цепочек вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических материалов.

Научная новизна. В диссертации впервые:

- построено теоретическое описание новых микромеханизмов совместного действия межзеренного скольжения и ротационной деформации, а также совместного действия межзеренного скольжения и скольжения решеточных дислокаций, испускаемых границами зерен в нанокристаллических твердых телах, впервые теоретически исследованы новые механизмы упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических материалах, проявляющих свойство сверхпластичности.
- разработаны теоретические модели новых механизмов зарождения деформационных нанодвойников на границах зерен и вблизи вершин трещин, инициированного предшествующими процессами межзеренной и внутризеренной деформации, в нанокристаллических твердых телах; впервые исследовано влияние зарождения нанодвойников вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических материалов;
- построены теоретические модели новых механизмов релаксации напряжений несоответствия, тормозящих зарождение трещин, в нанокристаллических пленках и покрытиях в результате действия межзеренного скольжения и ускоренного диффузионного массопереноса по границам зерен;
- построены теоретические модели новых механизмов пластической деформации, реализуемых за счет зарождения новых наноскопических зе-

рен внутри больших зерен и инициированных предшествующими процессами межзеренной и внутризеренной деформации, теоретически исследовано влияние зарождения таких нанозерен и их цепочек вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел.

Практическая значимость работы. Представленные в работе теоретические модели новых механизмов пластической деформации, мод accommodation и механизмов повышения трещиностойкости в нанокристаллических твердых телах является исключительно важными для понимания фундаментальных основ уникального поведения нанокристаллических твердых тел при пластической и сверхпластической деформации и могут быть использованы в практических задачах получения и контроля высоких механических характеристик нанокристаллических материалов, демонстрирующих пластичность и сверхпластичность. Разработанные теоретические модели объясняют ряд механизмов пластической деформации, наблюдаемых на эксперименте (вращение кристаллической решетки зерен в нанокристаллических твердых телах, зарождение деформационных нанодвойников в наноматериалах, образование новых наноскопических зерен в нанокристаллических металлах и керамиках, эффекты упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации) и предсказывают новые механизмы пластической деформации и эффекты (переход от зернограничного скольжения к ротационной деформации на тройных стыках границ зерен в нанокристаллических материалах, повышение трещиностойкости наноматериалов за счет зарождения нанозерен и нанодвойников вблизи вершин трещин, релаксация напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках за счет диффузионного переноса по границам зерен). Установление взаимосвязей между различными модами пластической деформации и accommodation, и идентификация специфических механизмов повышения трещиностойкости в нанокристаллических твердых телах чрезвычайно важны, как для построения общих фундаментальных теорий (сверх)пластичности и трещиностойкости нанокристаллических твердых тел, так и для эффективного развития технологий их производства и пластического формоизменения.

Достоверность результатов и выводов обеспечивается использованием корректных математических методов решения поставленных задач, проведением проверок и предельных переходов к уже известным решениям, сравнением, где это возможно, с результатами экспериментов. Физическая обоснованность построенных моделей подтверждается их соответствием экспериментальным наблюдениям поведения дефектов в нанокристаллических твердых телах.

Основные положения, представленные к защите:

- Модель механизма совместного действия межзеренного скольжения и ротационной деформации под действием внешнего напряжения, определение условий перехода от межзеренного скольжения к ротационной деформации в нанокристаллических твердых телах;

- Модель механизма аккомодации межзеренного скольжения за счет решеточного скольжения дислокаций, испускаемых границами зерен, и анализ конкуренции между эмиссией решеточных дислокаций из границ зерен с зарождением нанотрещин в нанокристаллических твердых телах;
- Модели механизмов упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических твердых телах при сверхпластической деформации за счет действия межзеренного скольжения вблизи тройных стыков границ зерен;
- Модели механизмов зарождения деформационных нанодвойников на границах зерен и вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах, и анализ влияния зарождения нанодвойников вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических материалов;
- Модели механизмов релаксации напряжений в нанокристаллических пленках и подложках за счет действия межзеренного скольжения и диффузионного массопереноса по границам зерен;
- Модели механизмов зарождения новых наноскопических зерен внутри больших зерен вблизи вершин трещин и исследование влияния образования и эволюции таких нанозерен и их цепочек вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на международной конференции 8-ой международной конференции “New Approaches to High-Tech: Nondestructive Testing and Computer Simulation in Science and Engineering” (Санкт-Петербург, Россия, 2004); международном семинаре “Plasticity of nanocrystalline materials” (Bostal, Germany, 2008); 38-ой международной конференции “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург (Репино), Россия, 2010); 39-ой международной конференции “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург (Репино), Россия, 2011); 40-ой международной конференции “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург, Россия, 2012); международной конференции “XX Петербургские чтения по проблемам прочности, посвященные памяти профессора В.А. Лихачева” (Санкт-Петербург, Россия, 2012); 11-ой международной конференции NANO 2012 (Rodos, Greece, 2012); 41-ой международной конференции “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург, Россия, 2013); 5-ой международной конференции NANOCON 2013 (Brno, Czech Republic, 2013) и семинарах в ФГБУН Институт проблем машиноведения РАН.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 36 научных статьях в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах, входящих в перечень ВАК. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав основного текста, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 193 страницы, включая 48 рисунков. Список литературы состоит из 209 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулирована основная цель работы, кратко представлены содержание диссертации, сведения о ее апробации и основных публикациях по ее теме, приведены положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена рассмотрению взаимодействия межзеренного скольжения и ротационной деформации, а также взаимодействие межзеренного скольжения и решеточного скольжения при (сверх)пластическом деформировании нанокристаллических твердых тел. На данный момент устоялась точка зрения, что одним из основных механизмов (сверх)пластической деформации в нанокристаллических и в мелкозернистых материалах является межзеренное скольжение, которое осуществляется путем скольжения зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса, параллельными плоскостям межзеренных границ, по которым эти дислокации скользят. Вместе с тем, наряду с межзеренным скольжением, в пластическую деформацию НКМ часто значимый вклад вносят такие специфические механизмы деформации, как ротационная деформация и скольжение решеточных дислокаций, испускаемых из границ зерен (см. например обзор [Мальгин, ФТТ, **49**, (2007) 961]). Реализация этих мод деформации может эффективно аккомодировать межзеренное скольжение, снижая локальные напряжения зернограничных дефектов, образующихся в тройных стыках границ зерен в результате действия межзеренного скольжения, при пластической и сверхпластической деформации НКМ. Таким образом, взаимодействие межзеренного скольжения с ротационной деформацией и решеточным скольжением дислокаций, испущенных границами зерен, снижает вероятность зарождения нанотрещин, что способствует повышению пластичности НКМ.

В экспериментальных работах по наблюдению *in situ* вращения кристаллической решетки в зернах в нанокристаллическом никеле со средним размером зерна 10 nm [Shan *et al*, Science **305**, 5684, (2004) 654] и нанокристаллической меди со средним размером зерна 30 nm [Носкова и др., ФММ, **91**, 6, (2001) 100] сообщалось, что дислокации внутри зерен при деформировании оставались неподвижными, тогда как по границам зерен протекали активные деформационные процессы, сопровождаемые ростом плотности зернограничных дислокаций. Это указывает на связь зернограничного скольжения и ротационной деформации. С учетом экспериментальных данных, в п. 1.1 было проведено теоретическое исследование совместного действия механизмов зернограничного скольжения и ротационной деформации и перехода от зернограничного скольжения к ротационной деформации в деформируемых нанокристаллических твердых телах.

В исходном состоянии рассматривалось скопление n_c зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса \vec{b} , поджатых внешним сдвиговым напряжением τ к тройному стыку границ зерен (Рис. 1а). Затем головная дислока-

ция скопления расщеплялась на две новые зернограничные дислокации с векторами Бюргера \vec{b}_1 и \vec{b}_2 , способные переползать по примыкающим к тройному стыку границ зерен с углом раствора 2ϕ (Рис. 1b). Такой процесс

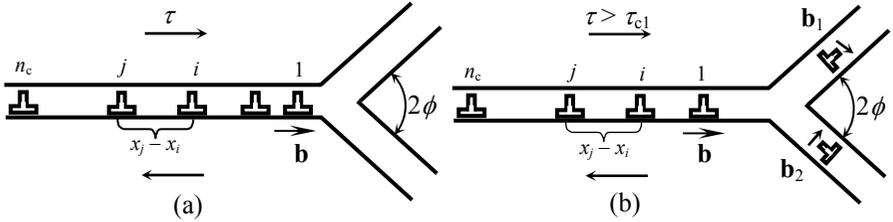


Рис. 1. Расщепление головной дислокации скопления скользящих зернограничных дислокаций, поджатых к тройному стыку границ зерен (а), на две зернограничные дислокации, переползающие по смежным границам (б). расщепления характеризовался изменением полной энергии системы

$\Delta W = W_2 - W_1 - A_\tau$, где W_1 и W_2 – энергии системы соответственно в исходном “нерасщепленном” (Рис. 1а) и конечном “расщепленном” состояниях (Рис. 1б). Уравнение $\Delta W = 0$ позволяет легко определить критическое сдвиговое напряжение τ_{c1} расщепления зернограничной дислокации на две переползающие (Рис. 1б).

Анализ зависимостей $\tau_{c1}(2\phi)$ показал, что расщепление головной дислокации на переползающие дислокации – начальная стадия перехода от зернограничного скольжения к ротационной деформации – происходит при меньших значениях τ_{c1} в области больших значений (80° - 120°) угла 2ϕ . Тогда как в теоретической работе [Fedorov *et al*, Acta Mater. **51**, 4, 887 (2003) 887] была показана энергетическая предпочтительность передачи зернограничного скольжения через тройной стык при малых значениях угла 2ϕ . Таким образом, если в ходе зернограничного скольжения формируется скопление скользящих зернограничных дислокаций, заторможенное тройным стыком границ зерен, то характер дальнейшей релаксации такой конфигурации в значительной мере зависит от геометрии тройного стыка: если примыкающие к нему границы зерен образуют острый угол, то вероятнее передача зернограничного скольжения через тройной стык, если тупой, то вероятнее переход к ротационным механизмам деформации.

Далее определим условия перехода от зернограничного скольжения к вращению зерен как целого (ротационной деформации) в НКМ. Рассмотрим два скопления скользящих зернограничных дислокаций разного знака, поджатых внешним сдвиговым напряжением τ к противоположным тройным стыкам границ зерен (Рис. 2а). При достижении напряжением τ некоторой критической величины τ_{c1} , происходит расщепление головных дислокаций скоплений на пары переползающих. Такие реакции расщепления происходят

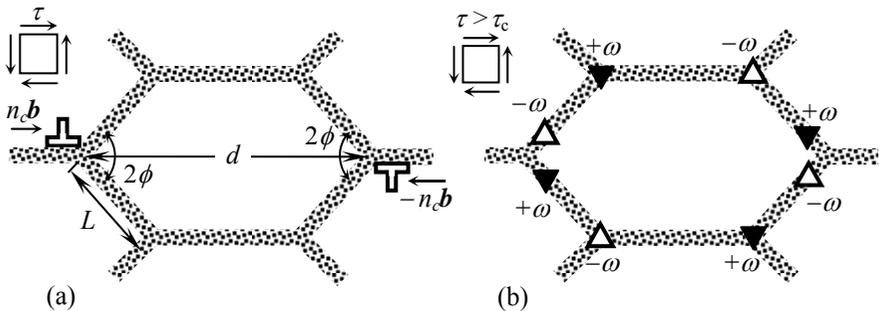


Рис. 2. Модель трансформации зернограничных дислокационных структур при переходе от зернограничного скольжения к ротационной деформации. (а) Две супердислокации, моделирующие скопления скользящих зернограничных дислокаций, поджатые напряжением τ к противоположным тройным стыкам границ зерен. (б) Четыре диполя частичных клиновых дисклинаций, моделирующих стенки переползающих дислокаций.

с каждой новой головной дислокацией скоплений, что со временем приводит к формированию, на примыкающих к тройным стыкам границ зерен, четырех стенок переползающих краевых дислокаций, которые по своим геометрическим и упругим характеристикам аналогичны четырем двусосным диполям частичных клиновых дисклинаций (Рис. 2б).

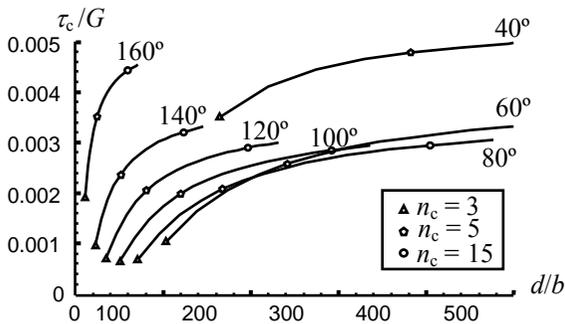


Рис. 3. Зависимости критического напряжения τ_c от размера зерна d для разных значений угла 2ϕ (отмечены над кривыми) и числа n_c зернограничных дислокаций в скоплении, при $\omega = 0.1$.

Для оценки выгоды этого процесса были рассчитаны полные энергии \tilde{W}_1 и \tilde{W}_2 конфигураций дефектов, показанных на Рис. 2а и Рис. 2б, соответственно, и найдено соответствующее изменение энергии $\Delta\tilde{W} = \tilde{W}_2 - \tilde{W}_1$. Затем из условия $\Delta\tilde{W} = 0$ было определено критическое напряжение τ_c перехода от зернограничного скольжения к ротационной деформации. Результаты расчетов критического напряжения τ_c в зависимости от размера зерна d показаны на Рис. 3 при различных значениях угла 2ϕ . Из анализа зависимостей $\tau_c(d)$ был сделан ключевой вывод, что

критическое напряжение τ_c уменьшается с уменьшением размера зерна d (измельчением зерна).

Таким образом, была построена теоретическая модель, описывающая новый микромеханизм перехода от зернограничного скольжения к ротационной деформации, которая согласуется с экспериментальными наблюдениями вращения зерен в нанокристаллических металлах и сплавах с мелкими нанозернами ($d < 10...30$ nm) [Shan *et al*, Science **305**, 5684 (2004) 654, Носкова и др., ФММ, **91**, 6 (2001) 100].

П. 1.2 посвящен теоретическому описанию взаимодействия межзеренного скольжения и решеточного скольжения, которое выступает в роли механизма аккомодации межзеренного скольжения. Согласно представлениям в работе [Ovid'ko *et al*, Phys. Rev. B **77** (2008) 054109], межзеренное скольжение приводит к формированию зернограничных дисклинаций, поля упругих напряжений которых способны инициировать зарождение нанотрещин в деформируемых наноматериалах. Вместе с тем, наряду с межзеренным скольжением, в пластическую деформацию НКМ часто значимый вклад вносит скольжение решеточных дислокаций, испускаемых из границ зерен (см., например, обзор [Bobylev, МРМ **12** (2011) 126]). Подобное испускание частичных дислокаций из границ зерен, вдоль которых реализуется межзеренное скольжение, может эффективно снижать локальные напряжения диполей зернограничных дисклинаций. Снижение локальных напряжений диполей зернограничных дисклинаций, в свою очередь, уменьшает вероятность зарождения нанотрещин на таких дефектах, что способствует повышению пластичности НКМ. Все это обуславливает существенный интерес к выявлению особенностей процессов наномасштабной пластической деформации, реализуемой вблизи тройных стыков границ зерен посредством межзеренного скольжения и испускания решеточных дислокаций из границ зерен, а также конкуренции таких процессов с зарождением нанотрещин вблизи тройных стыков границ зерен в деформируемых НКМ.

В рамках нашей модели, межзеренное скольжение вдоль границ зерен AB и CD приводит к образованию двух диполей клиновых дисклинаций с мощностью $\pm\omega$ (в дальнейшем называемых $\pm\omega$ -дисклинациями), составляющих дисклинационный квадруполь с плечами L и s (Рис. 4a,b). в рамках предлагаемой модели, межзеренное скольжение вдоль границ зерен AB и CD приводит к образованию двух диполей клиновых дисклинаций с мощностью $\pm\omega$ (в дальнейшем называемых $\pm\omega$ -дисклинациями), составляющих дисклинационный квадруполь с плечами L и s (Рис. 4a,b). Рассмотрим испускание частичной дислокации с вектором Бюргерса $-\mathbf{b}$ (в дальнейшем называемой $(-b)$ -дислокацией) из границы зерна AB в прилегающее зерно под действием внешнего сдвигового напряжения τ и поля сдвиговых напряжений, которое создается диполями зернограничных $\pm\omega$ -дисклинаций (Рис. 4c). Испускания частичной $(-b)$ -дислокации можно представить, как зарождение диполя дислокаций Шокли с векторами Бюргерса \mathbf{b} и $-\mathbf{b}$ (Рис. 4c).

Испускание решеточной b -дислокации (Рис. 4с) характеризуется разностью энергий $\Delta W = W_2 - W_1$, где W_1 – энергия системы в начальном состоянии, содержащем только квадруполь зернограничных дисклинаций (Рис. 4а,б), W_2 – энергия системы после испускания частичной ($-b$)-дислокацией в

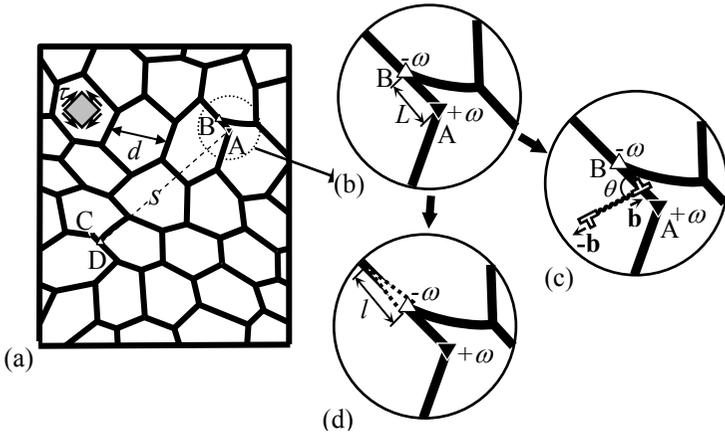


Рис. 4. 2-мерная модель нанокристаллического образца с квадруполем зернограничных $\pm\omega$ -дисклинаций $ABCD$, (а). Вставка с увеличенным фрагментом нанокристаллического материала, в котором находится диполь зернограничных $\pm\omega$ -дисклинаций AB (б). Испускание частичной ($-b$)-дислокации из сегмента границы зерна AB (с). Зарождение нанотрещины в поле напряжений диполя зернограничных $\pm\omega$ -дисклинаций (д).

тело зерна (Рис. 4с). Процесс испускания b -дислокации энергетически выгоден при выполнении условия $\Delta W < 0$. В результате вычислений было получено следующее аналитическое выражение для разности энергий ΔW :

$$\Delta W = \frac{Db\omega}{2} \left\{ h \ln \frac{h^2((s-p)^2 + h^2)}{(s^2 + h^2)(p^2 + h^2)} \right\} + Db^2 \left(\ln \frac{p-r_c}{r_c} + 1 \right) + \gamma_{st}p + \tau p b \cos 2\theta + (h - l \sin \theta) \left(\ln \left[1 + \frac{p^2 + 2lp \cos \theta}{l^2 + h^2 - 2lh \sin \theta} \right] - \ln \left[1 + \frac{p^2 - 2sp + 2lp \cos \theta}{l^2 + s^2 + h^2 - 2l(h \sin \theta + s \cos \theta)} \right] \right). \quad (1)$$

С помощью формулы (1) проведем анализ зависимости разности энергий ΔW от параметров системы на примере кубической фазы нанокристаллического карбида кремния 3С-SiC. Расчет зависимостей ΔW от расстояния p и угла θ показал, что испускание частичных дислокаций Шокли является энергетически выгодным в интервале углов $65^\circ < \theta < 95^\circ$ и сопровождается постоянным понижением энергии с увеличением расстояния p , тогда как ис-

пускание полных решеточных дислокаций является энергетически невыгодным в рассматриваемом нами диапазоне параметров дефектной структуры.

Рассмотрим процесс зарождения нанотрещины длиной l на дисклинации с мощностью $-\omega$ вдоль границы зерна в области, где растягивающие напряжения, создаваемые дисклинационным диполем, являются максимальными (Рис. 4d). Условие энергетически выгодного роста трещины задается следующим неравенством [Ovid'ko, Sheinerman, Acta Mater. **57** (2009) 2217]: $q(\tilde{l}) > q_c$. Здесь $\tilde{l} = l/L$,

$$q(\tilde{l}) = \tilde{l} \left[\left(\frac{2(\sqrt{1+\tilde{l}} - 1)}{\tilde{l}} - \ln \frac{\sqrt{1+\tilde{l}} + 1}{\sqrt{1+\tilde{l}} - 1} \right)^2 + \left(\frac{\tau}{D\omega} \right)^2 \right],$$

$$q_c = 16\pi(1-\nu)(2\gamma - \gamma_b)/(Gp\omega^2), \quad (2)$$

где γ - удельная поверхностная энергия, γ_b - энергия границы зерна на единицу площади. Условие $q(l_{e1,2}/p) = q_c$ позволяет найти критические длины l_{e1} и l_{e2} нанотрещины. Зарождение и рост нанотрещины в интервале $l < l_{e1}$ требует термических флуктуаций. Ее последующий рост в интервале длин $l_{e1} < l < l_{e2}$ энергетически выгоден и происходит атермическим образом. Дальнейший рост нанотрещины $l > l_{e2}$ энергетически не выгоден. Зададим нижнее значение l_{e1} критической длины нанотрещины равным $l_{e1} = 5a$, где a - параметр решетки. С помощью формул (2) и уравнения $q(l_{e1,2}/p) = q_c$ определим значения мощности ω и плеча L зернограничных дисклинаций, при которых критическая длина трещины равна $l_{e1} = 5a$. Проведем этот расчет на примере нанокристаллической керамики 3C-SiC, используя следующие характеристические значения ее параметров $\gamma = 1,5 \text{ J/m}^2$, $\gamma_b = 0.5\gamma$.

На Рис. 5 изображено пространство параметров (L, θ) , которое разделено на области, определяющие, где энергетически выгодно зародиться нанотрещине, а где испускаться частичной ($-b$)-дислокации при $\omega = 30^\circ$ и $p = 1 \text{ nm}$. Горизонтальная пунктирная линия отделяет область параметров (L, θ) , в которой зарождение нанотрещины с длиной $l_{e1} = 5a$ энергетически выгодно, от области параметров (L, θ) , в которой это зарождение невыгодно. Для системы с параметрами, значения которых находятся в области I, энергетически выгодно испускаться частичным дислокациям (заштрихованная область), а зарождение нанотрещины энергетически невыгодно (Рис. 5). Для системы с параметрами, значения которых находятся в области II возможно, как зарождение нанотрещины, так и испускание частичных дислокаций (области, закрашенные серым цветом) (Рис. 5). Область III, задает значения параметров (L, θ) , при которых энергетически выгодно зарождение только нанотрещины

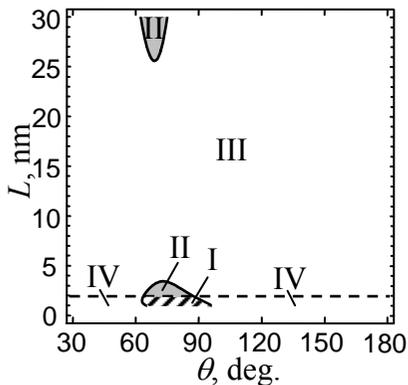


Рис. 5. Диаграмма, определяющая области параметров (L, θ) , в которых испускание частичных дислокаций и/или зарождение нанотрещины являются энергетически выгодными процессами.

препятствует зарождению трещин и, следовательно, повышает пластические свойства деформируемых нанокристаллических материалов.

В п. 1.3 разработана теоретическая модель, дающая детальное описание особенностей сверхпластической деформации (эффектов упрочнения и разупрочнения, а также высокого напряжения течения) в нанокристаллических твердых телах за счет действия межзеренного скольжения.

Нанокристаллические материалы отличаются высокой прочностью, которая в 2-10 раз больше, чем в крупнозернистых материалах того же химического состава, но при этом характеризуются крайне низкой пластичностью. Однако, на данный момент, обнаружен ряд нанокристаллических сплавов, проявляющих свойство сверхпластичности. Оказалось, что эффект сверхпластичности в этих материалах достигается при более низких температурах и более высоких скоростях деформации, что открывает огромные перспективы его промышленного использования. Кроме того, было обнаружено существенное упрочнение материала в процессе сверхпластической деформации. В результате в последние годы появилось множество экспериментальных и теоретических работ [Мальгин, ФТТ **48** (2006) 651], посвященных исследованию сверхпластичности в мелкозернистых и нанокристаллических материалах. В основном это сплавы на основе алюминия [Mishra *et al*, Phil. Mag. A **81**, 1 (2001) 37], титана [Mishra *et al*, Mater. Sci. Eng. A **298**, 1-2 (2001) 44] и интерметаллидный сплав Ni_3Al [Valiev *et al*, Phil. Mag. A **81**, 1 (2001) 25]. Согласно этим экспериментальным наблюдениям, именно межзеренное скольжение, сопровождаемое механизмами аккомодации – миграцией границ зерен и приграничным решеточным скольжением, считается доминирующим механиз-

(Рис. 5). Наконец, в области IV, как зарождение нанотрещин, так и испускание частичных дислокаций являются энергетически невыгодными процессами (Рис. 5). Из зависимостей на Рис. 5 видно, что область I, где возможно только испускание частичных дислокаций, находится в интервале малых значений плеч $0 < L < 2 \text{ nm}$ дисклинационных диполей.

Таким образом, в этом разделе было показано, что испускание дислокаций Шокли из границ зерен может служить эффективным микромеханизмом релаксации упругих напряжений, создаваемых зернограничными дисклинациями, которые образуются в результате реализации межзеренного скольжения. При этом испускание дислокаций Шокли из границ зерен, препятствует зарождению трещин и, следовательно, повышает пластические свойства деформируемых нанокристаллических материалов.

мом сверхпластической деформации в НКМ. В этой связи представляется исключительно важным теоретическое описание необычного сверхпластического поведения нанокристаллических металлов и сплавов, связанного со специфическими особенностями межзеренного скольжения.

Основываясь на экспериментальных данных, нами была теоретически рассмотрена модель, которая учитывала коллективное поведение зернограничных дефектных структур и зарождение решеточных дислокаций на тройных стыках границ зерен как механизм аккомодации этих структур. В рамках модели рассматривалась бесконечная периодическая дефектная конфигурация, образованная бесконечными рядами диполей зернограничных дислокаций, распределенных по границам зерен. Под действием внешнего сдвигового напряжения τ на тройных стыках границ зерен происходили трансформации зернограничных дислокаций, которые со временем приводили к росту мощностей разностных дислокаций в тройных стыках границ зерен и распрямлению тройных стыков вдоль направления, совпадающего с действием максимального сдвигового напряжения. При достижении векторами Бюргерса разностных дислокаций некоторого критического значения происходило их расщепление с образованием решеточных \bar{b}_l -дислокаций и остаточных разностных дислокаций. Эмиссия решеточных дислокаций из тройных стыков и их последующие скольжение в зернах являлось элементарным актом решеточного скольжения, которое выступало в роли механизма аккомодации зернограничных структур, сглаживая эффект упрочнения и давая дополнительный вклад в общую пластическую деформацию. После первого испускания решеточных дислокаций происходило очередное накопление разностных дислокаций в тройных стыках границ зерен, и процесс эмиссии решеточных дислокаций повторялся. В модели был проведен расчет энергетических характеристик и получены критические напряжения действия этих механизмов пластической деформации, которые задавали значение напряжения течения τ_f нанокристаллического материала при сверхпластической деформации.

Оценка общей пластической деформации производилась с помощью формулы:

$$\varepsilon = (1 + \lambda)(\varepsilon_{GB} + \varepsilon_l), \quad (3)$$

где $\varepsilon_{GB} = nb_2/d$ – вклад межзеренного скольжения в общую пластическую деформацию, $\varepsilon_l = mb_1/d$ – вклад решеточного скольжения в общую пластическую деформацию, n и m – соответственно число элементарных актов скольжения зернограничных дислокаций с вектором Бюргерса b_2 и решеточных дислокаций с вектором Бюргерса b_1 .

На Рис. 6 приведены результаты численных расчетов зависимости $\sigma_f = 2\tau_f$ от ε (сплошная линия), которые проводились на примере нанокристаллического алюминий-литиевого сплава (Al-5Mg-2Li) со следующими значениями параметров: $G = 28.5$ GPa и $\nu = 0.31$, средний размер зерна

$d = 100$ nm, величина вектора Бюргера зернограницных дислокаций $b_2 = 0.1$ nm, угол $\alpha_0 = 160^\circ$ и коэффициент $\lambda = 0.1$. Сравнение теоретической кривой с экспериментальной кривой (пунктирная линия) сверхпластической деформации того же нанокристаллического сплава показало хорошее численное совпадение (Рис. 6). Зубчатость теоретической кривой связана с вкладом в сверхпластическую деформацию решеточного скольжения. Каждый элементарный акт решеточного скольжения вызывает заметное падение величины критического напряжения, приводя к локальному разупрочнению, которое не чувствуется на эксперименте, где измеряется усредненное значение напряжения течения. В рассмотренной модели вклад в общую пластическую деформацию ($\varepsilon \approx 1.5$) от межзеренного скольжения составил $\varepsilon_{GB} = 0.7\varepsilon$, а от решеточного скольжения $\varepsilon_l = 0.2\varepsilon$, что указывает на роль решеточного скольжения как механизма аккомодации межзеренного скольжения.

Таким образом, п. 1.3 было показано, что конкуренция между механизмом упрочнения, характеризуемым ростом мощности разностных дислокаций в тройных стыках границ зерен вследствие трансформаций зернограницных дислокаций – носителей межзеренного скольжения и механизмом разупрочнения, связанным с локальной миграцией границ зерен и испусканием тройными стыками решеточных дислокаций – носителей решеточного скольжения, определяет уникальное поведение нанокристаллических металлов и сплавов, проявляющих свойство сверхпластичности, которое открывает обширные перспективы их прикладного использования.

Вторая глава посвящена рассмотрению теоретических моделей зарождения деформационных двойников в нанокристаллических твердых телах. Как уже отмечалось выше, в НКМ действуют специфические механизмы пластичности, которые либо вообще не работают в обычных материалах, либо проявляются при некоторых особых условиях (при низких или высоких температурах, повышенной концентрации примесей, высоких скоростях деформации и т. д.). Согласно многочисленным экспериментальным данным, компьютерному моделированию и теоретическим моделям одним из таких специфических механизмов пластичности является деформация нанодвойникованием, которая эффективно действует в наноматериалах с различным химическим составом и структурой (см., например, обзор [Zhu *et al*, Progr. Mater.

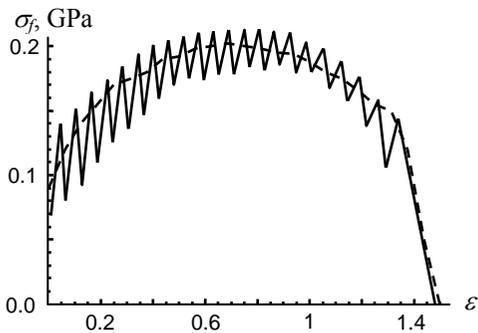


Рис. 6. Теоретическая (сплошная линия) и экспериментальная (пунктирная линия) кривые деформирования нанокристаллического сплава Al-5Mg-2Li.

Sci. 57 (2012) 1; Малыгин, ФТТ 53 (2011) 711]). Следуя этим данным, деформационные двойники в наноматериалах под механической нагрузкой часто зарождаются на границах зерен в противоположность крупнозернистым поликристаллам, где деформационные двойники обычно зарождаются внутри зерен.

Давно установлено, что деформационные двойники в ГЦК кристаллах образуются в результате кооперативного скольжения частичных дислокаций Шокли по ряду соседних параллельных плоскостей $\{111\}$. Естественно возникает вопрос об источниках таких дислокаций, способных испустить большое их количество в условиях, когда движение испущенных дислокаций ограничено наноскопическим размером зерна. Источники должны быть достаточно протяженными, чтобы обеспечить значительную толщину образуемой двойниковой прослойки, и достаточно мощными, чтобы не закрыться под действием поля напряжения первых испущенных и заторможенных границей зерна дислокаций. В роли таких источников высоких локальных напряжений в НКМ могут, в частности, выступать зернограничные дисклинации, которые часто зарождаются на границах зерен в НКМ в процессе их получения, и трещины. Основываясь на этих данных, в п. 2.1 построены теоретические модели зарождения деформационных нанодвойников на границе зерна в поле упругих напряжений двухосного диполя клиновых зернограничных дисклинаций или вблизи вершины трещины.

Рассмотрим последовательную эмиссию двойникующих дислокаций в тело зерна из некоторого участка его границы (Рис. 7). В рамках используемого ниже континуального подхода процесс эмиссии двойникующей дислокации из границы зерна состоит в появлении диполя частичных дислокаций Шокли с векторами Бюргерса $\pm \mathbf{b}$, одна из которых (b -дислокация) скользит в тело

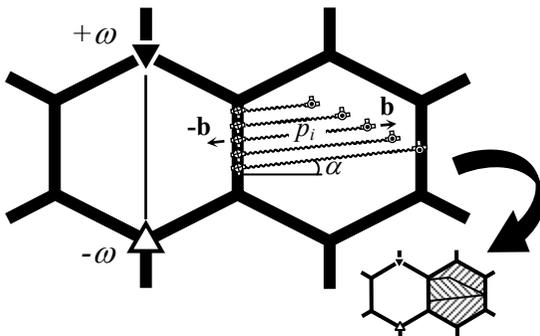


Рис. 7. Модель зарождения деформационного двойника на границе зерна в нанокристаллическом материале под действием внешнего приложенного напряжения τ и поля напряжений двухосного диполя стыковых клиновых дисклинаций с удельной мощностью $\pm \omega$.

зерна, а вторая ($-b$ -дислокация) остается в границе. Эти дислокации имеют краевые (с векторами Бюргерса $\pm \mathbf{b}_1$) и винтовые (с векторами Бюргерса $\pm \mathbf{b}_2$) компоненты. Двигаясь вдоль параллельных плоскостей скольжения, испущенные b -дислокации формируют позади себя полосы дефекта упаковки шириной p_i (здесь i – номер испущенной b -дислокации) с удельной поверхностной энергией

γ (Рис. 7). Используемый в модели отдельный диполь клиновых дисклинаций с мощностью $\pm\omega$, расположенных в соседних тройных стыках границ зерен, служит источником дополнительных локальных напряжений, которые инициируют зарождение частичных дислокаций (Рис. 7). В рамках предложенной модели эмиссия первой b -дислокации становится возможной при достижении внешним сдвиговым напряжением τ некоторой критической величины $\tau_c^{(1)}$. При $\tau \geq \tau_c^{(1)}$ первая b -дислокация испускается границей зерна и, в зависимости от выбранных значений параметров модели, либо доходит до противоположной границы зерна, либо занимает внутри зерна некоторое равновесное положение. В любом случае, первая испущенная b -дислокация затрудняет эмиссию следующей частичной b -дислокации. Это приводит к необходимости повышения величины внешнего сдвигового напряжения τ до некоторого нового критического значения $\tau_c^{(2)} > \tau_c^{(1)}$, при котором оказывается возможным испускание второй b -дислокации. После испускания вторая b -дислокация занимает в теле зерна некоторое положение устойчивого равновесия, так как между первой и второй b -дислокациями действуют отталкивающие силы. Каждое новое испускание b -дислокации требует очередного повышения критического напряжения $\tau_c^{(n)} > \tau_c^{(n-1)}$ и смещает испущенные ранее b -дислокации в новые положения устойчивого равновесия. Результатом такой последовательной эмиссии b -дислокаций и перекрытия тянущихся за ними полос дефекта упаковки становится образование достаточно толстой двойниковой пластины (см. врезку на Рис. 7). Определим условия, необходимые для эмиссии любой из этих дислокаций. Для этого исследуем переход дефектной системы из $(n-1)$ -ого состояния с полной энергией W_{n-1} , соответствующего наличию $(n-1)$ диполя частичных $\pm b$ -дислокаций, в n -ое состояние с полной энергией W_n , соответствующее зарождению n -ого дислокационного диполя. Такая трансформация дефектной системы энергетически выгодна при выполнении условия $\Delta W_n = W_n - W_{n-1} < 0$. Положения \tilde{p}_i устойчивого равновесия испущенных частичных b -дислокаций соответствуют точкам минимума на зависимостях $\Delta W_n(p_i)$ и могут быть найдены из уравнений: $\partial \Delta W_n / \partial p_i = 0$. Уравнение $\Delta W_n = 0$ позволяет определить критическое сдвиговое напряжение $\tau_c^{(n)}$ зарождения n -ого диполя частичных $\pm b$ -дислокаций. Из этого уравнения с помощью описанного алгоритма определения положений устойчивого равновесия испущенных частичных b -дислокаций были найдены зависимости критического сдвигового напряжения τ_c от числа частичных дислокаций n при различных значениях мощности ω диполя клиновых $\pm\omega$ -дисклинаций. Расчеты проводились на примере нанокристаллических Cu и Al и представлены на Рис. 8.

Видно, что на начальной стадии образования двойника наблюдается рост критического напряжения τ_c (первая стадия локального упрочнения) (Рис 8). Достигнув некоторого уровня τ_{sat} , кривая $\tau_c(n)$ выходит на насыщение и до

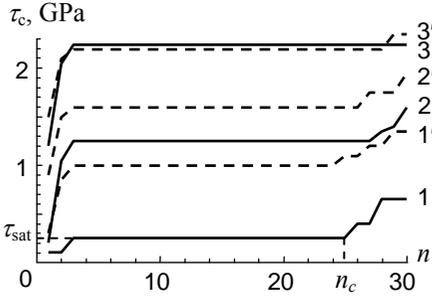


Рис. 8. Зависимость критического напряжения (вторая стадия локального упрочнения) τ_c эмиссии двойнивающей дислокации от ее порядкового номера n в нанокристаллических Cu (кривые 1-3) и Al (кривые 1'-3') при различных значениях мощности дисклинационного диполя: $\omega = 0.5$ (кривые 1, 1'), 0.4 (кривые 2, 2') и 0.3 (кривые 3, 3').

определенного момента не зависит от числа n испущенных частичных b -дислокаций (стадия локального течения за счет утолщения двойниковой пластины) (Рис. 8). Наконец, для испускания частичной дислокации с номером, превышающим некоторое критическое число n_c , снова требуется повышение критического напряжения

определенного момента не зависит от числа n испущенных частичных b -дислокаций (стадия локального течения за счет утолщения двойниковой пластины) (Рис. 8). Наконец, для испускания частичной дислокации с номером, превышающим некоторое критическое число n_c , снова требуется повышение критического напряжения

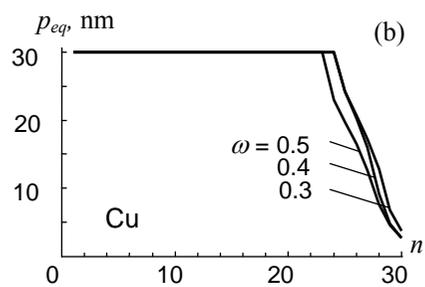
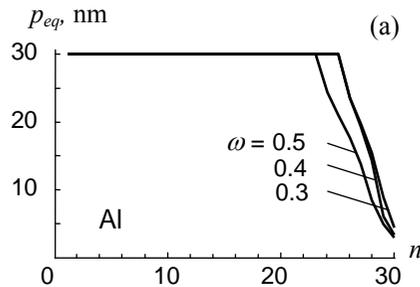


Рис. 9. Зависимость равновесного положения p_{eq} двойнивающей дислокации от ее порядкового номера n в нанокристаллических Al (a) и Cu (b) при различных значениях мощности дисклинационного диполя: $\omega = 0.3, 0.4$ и 0.5 .

деформационного нанодвойника, которая в нашей модели в нанокристаллических Al и Cu определяется приблизительно равными критическими числами испущенных двойнивающих дислокаций $n_c \approx 24-30$ (Рис. 9a,b). Взяв рас-

стояние δ между соседними атомными плоскостями $\{111\}$ как $\delta_{Al} \approx 0.234$ nm и $\delta_{Cu} \approx 0.207$ nm, получаем оценки толщины двойниковой пластины: $\approx 5.6-7$ nm для Al и $\approx 5-6$ nm для Cu. Полученные оценки толщины двойниковой пластины хорошо согласуются с изображениями деформационных двойников, наблюдавшимися в нанокристаллических Al и Cu с помощью просвечивающей электронной микроскопии прямого разрешения (HRTEM) [Liao *et al*, Appl. Phys. Lett. **84**, 4 (2004) 592; Chen *et al*, Science **300**, 5623, (2003) 1275].

Далее рассмотрим условия реализации механизма зарождения деформационных двойников на границах зерен (предложенного в п. 2.1.1) вблизи вершины трещины смешанного типа. В рамках модели, зарождение деформационного двойника происходит в результате испускания частичных дислокаций из границы зерна под действием суперпозиции внешнего напряжения, с учетом его концентрации вблизи вершины трещины, и поля напряжений зернограничной дислокации, находящейся вблизи вершины трещины.

Рассмотрим двумерную модель нанокристаллического материала, находящегося под действием внешнего растягивающего напряжения σ (Рис. 10). Предполагается, что под действием этого напряжения в наноматериале развивается плоская трещина длиной L (Рис. 10), как трещина одновременно плоского сдвига и нормального разрыва. В рамках модели трещина распространяется вдоль направления действия максимальных касательных напряжений τ (Рис. 10). Далее в совместном поле внешнего сдвигового напряжения

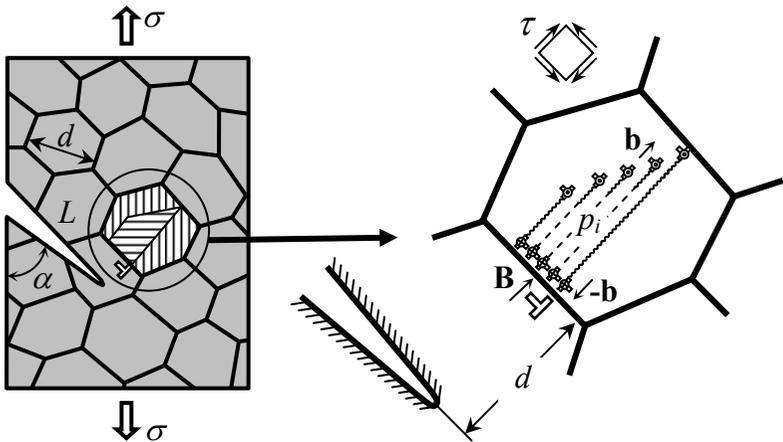


Рис. 10 Модель зарождения деформационного двойника на границе зерна в нанокристаллическом материале под действием внешнего напряжения σ сконцентрированного плоской трещины длиной L .

τ и напряжений, создаваемых трещиной, вблизи вершины трещины зарождается скользящая решеточная дислокация с вектором Бюргерса \mathbf{B} (B -дислокация), которая под действием этого поля перемещается в направлении

перпендикулярном направлению распространения трещины (Рис. 10). В модели предполагается, что эта дислокация, достигнув границы зерна, оседает на ней и становится источником, на котором происходит зарождения первой частичной дислокации Шокли с вектором Бюргерса \mathbf{b} (b -дислокации) с последующей эмиссией этой дислокации из границы зерна. Дальнейший механизм образования двойниковой прослойки (за счет последовательной эмиссии частичных дислокаций из границы зерна) аналогичен рассмотренному в предыдущем разделе. Вследствие этого, сразу перейдем к результатам модели, описывающей зарождение нанодвойника вблизи вершины трещины. В результате численных расчетов были получены зависимости $\tau_c(n)$ и $p_{eq}(n)$ (аналогичные зависимостям представленным на Рис. 8 и Рис. 9) на примере нанокристаллического Al и нанокристаллической керамики 3C-SiC при длине трещины $L = 3d, 10d, 20d$ и $200d$, где d – размер зерна, который брался равным 30 nm. Величины критических напряжений, при которых осуществляется рост толщины нанодвойника при длинах трещины $L = 20d$ и $200d$ значительно ниже, чем в случае зарождения нанодвойника в поле дисклинационного диполя. Это объясняется более высокой концентрацией напряжений вблизи вершины трещины. Оценки толщины двойниковой пластины дают примерно 3-10nm для Al и 3-6nm для 3C-SiC, что хорошо согласуется с данными просвечивающей электронной микроскопии.

Таким образом, разработаны теоретические модели, описывающие зарождение деформационных двойников на границах зерен в НКМ под действием внешнего напряжения и поля напряжений диполя зернограницных клиновых дисклинаций, и внешнего приложенного напряжения сконцентрированного трещиной. Показано, что если мощность ω зернограницных дисклинаций или длина трещины L достаточно велики, то для зарождения деформационного двойника не требуется преодоления энергетического барьера.

Уровень критического напряжения τ_c на всех этих стадиях очень сильно зависит от мощности дисклинационного диполя ω или длины трещины L : уменьшение ω и L приводит к резкому росту уровня τ_c . Изучение зависимости равновесного положения двойнивающей дислокации от ее порядкового номера позволило получить форму фронта двойниковой пластины. Сделанные теоретические оценки толщины двойниковой пластины так же соответствуют эксперименту.

В п. 2.2 построена теоретическая модель зарождения деформационных нанодвойников за счет идеальных сдвигов вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах. Традиционным микромеханизмом зарождения деформационных двойников в нанокристаллических металлах является множественное испускание частичных дислокаций из границ зерен в тело зерна. Однако, в этом случае, для образования двойника требуется, чтобы частичные дислокации уже существовали на достаточно протяженном участке границы зерна на каждой плоскости скольжения, что маловероятно реализуется на практике. Принимая во внимание недостатки традиционного микромеханизма

зарождения двойников, в теоретической работе [Ovid'ko, Sheinerman, Rev. Adv. Mater. Sci. **27**, 2 (2011) 189-194] был предложен новый микромеханизм зарождения деформационных нанодвойников, который позволяет избежать необходимости существования частичных дислокаций на каждой плоскости скольжения. Этот микромеханизм осуществляется за счет множественных наноскопических сдвигов, определяемых как идеальный сдвиг внутри наноразмерной области. Однако в работе [Ovid'ko, Sheinerman, Rev. Adv. Mater. Sci. **27**, 2 (2011) 189] было показано, что действие этого микромеханизма возможно только при очень высоких внутренних напряжениях. Хорошо известно, что основными концентраторами напряжений в твердых телах являются микротрещины, вблизи вершин которых уровень локальных напряжений превышает уровень напряжений в остальном материале в 3-4 раза. Таким образом, целью настоящего раздела является исследование зарождения деформационного нанодвойника, за счет идеальных сдвигов в наноскопической области вблизи вершины микротрещины, и его влияние на трещиностойкость нанокристаллических материалов.

В рамках модели, предполагается, что трещина нормального отрыва типа длиной l концентрирует внешнее напряжение, создавая вблизи своей вершины область высоких локальных напряжений, которые способствуют зарождению деформационного нанодвойника $ABCD$ (Рис. 11a,b). Деформационный нанодвойник $ABCD$ зарождается и развивается вблизи вершины трещины за счет последовательной реализации идеальных наноскопических сдвигов на параллельных плоскостях скольжения, что схематично показано на Рис. 11. В терминах дислокаций процесс образования нанодвойника можно представить как последовательное зарождение n диполей частичных дислокаций, соединенных между собой дефектом упаковки. На каждом акте зарождения диполя частичных дислокаций вектора Бюргерса s этих дислокаций растут от 0 до величины b вектора Бюргерса дислокации Шокли, что сопровождается соответствующей эволюцией обобщенного дефекта упаковки, который соединяет неподвижные дислокации, составляющие диполь. Поле напряжений, создаваемых нанодвойником $ABCD$ (Рис. 11a), сформировавшимся в результате n идеальных наноскопических сдвигов, может быть эффективно описано полем напряжения дисклинационного квадруполь с мощностью дисклинаций $\pm\Omega$ ($\pm\Omega$ -дисклинациями) (Рис. 11b). В настоящей работе мы исследуем условия зарождения $(n+1)$ -ого диполя дислокаций Шокли EF (путем зарождения и развития нановозмущения), который примыкает к нанодвойнику $ABCD$, ранее образовавшемуся вблизи вершины трещины в деформируемом нанокристаллическом материале (Рис. 11c). Вначале зарождается диполь частичных дислокаций с бесконечно малыми векторами Бюргерса $\pm s$, величина которых s затем растет до величины b вектора Бюргерса дислокаций Шокли (Рис. 11c,d). Этот процесс сопровождается соответствующим изменением обобщенного дефекта упаковки, который соединяет дислокации диполя. В результате этого процесса толщина h_0 нанодвойника $ABCD$ увеличивается на рас-

стояние p (между ближайшими плоскостями скольжения $\{111\}$), что приводит к образованию нового нанодвойника $ABEF$, характеризуемого толщиной $h = h_0 + p$ (Рис. 11е). Будем полагать, что рассмотренный выше процесс роста нанодвойника по механизму нановозмущений может повторяться до тех пор, пока это будет энергетически выгодно, то есть пока этот процесс будет сопровождаться понижением полной энергии системы.

Зарождение $(n+1)$ -ого диполя EF частичных $\pm s$ -дислокаций (Рис. 11с-е) в наноматериале (исходно содержащем только трещину и нанодвойник $ABCD$) сопровождается изменением энергии системы на величину ΔW (на единицу длины дислокации) и энергетически выгодно при выполнении условия $\Delta W < 0$. Наши вычисления показали, что при $\tau = 0.5, 1$ или 1.3 ГПа раз-

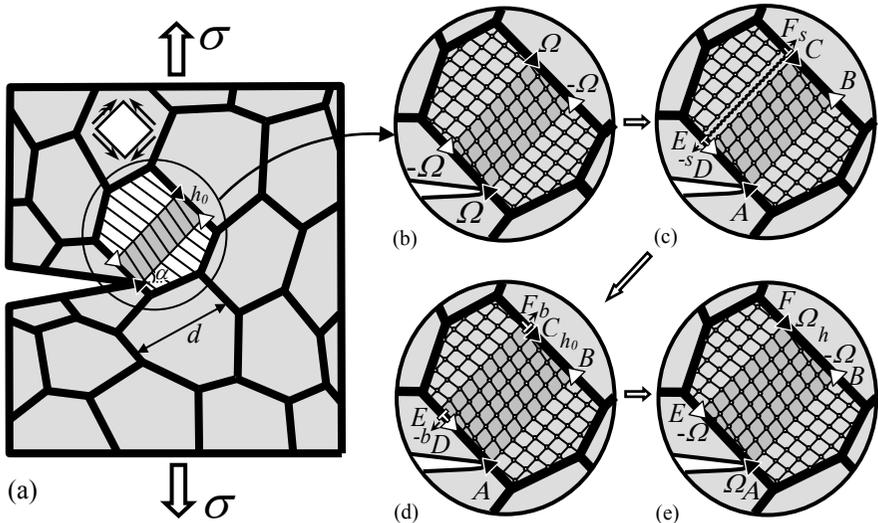


Рис. 11. Рост нанодвойника за счет идеальных сдвигов в деформируемом нанокристаллическом материале вблизи вершины трещины (2-мерная модель).

ность энергий ΔW не является монотонно убывающей функцией s/b при $0 \leq s/b \leq 1$. Это означает, что при этих значениях внешнего сдвигового напряжения τ для зарождения диполя $\pm b$ -дислокаций Шокли требуется преодоление энергетического барьера. При сдвиговых напряжениях $\tau > 1.4$ ГПа разность энергий ΔW отрицательна и монотонно убывает с ростом отношения s/b в интервале $0 \leq s/b \leq 1$. Это говорит о возможности безбарьерного зарождения диполя частичных $\pm b$ -дислокаций Шокли при $\tau > 1.4$ ГПа.

Изучим влияние квадруполя $\pm\Omega$ -дисклинаций, который появился в результате зарождения деформационного нанодвойника $ABEF$ (Рис. 11) вблизи вершины трещины, на трещиностойкость нанокристаллического материала.

Для анализа влияния дисклинационного квадруполя на развитие трещины воспользуемся энергетическим критерием роста трещины. В рассматриваемом нами случае плоского напряженного состояния этот критерий имеет вид:

$$\frac{1-\nu}{2G}(K_I^2 + K_{II}^2) = 2\gamma_e, \quad (4)$$

где $K_I = K_I^\sigma + k_I^q$ и $K_{II} = k_{II}^q$ – коэффициенты интенсивности нормальных и сдвиговых напряжений соответственно; K_I^σ – коэффициент интенсивности напряжений, созданных внешней нагрузкой σ , а k_I^q и k_{II}^q – коэффициенты интенсивности напряжений, созданных квадруполем $\pm\Omega$ -дисклинаций γ_e – удельная поверхностная энергия берегов разреза трещины.

Локальная пластическая деформация, связанная с образованием нанодвойника, влияет на дальнейший рост трещины. Это влияние можно учесть путем введения критического значения коэффициента интенсивности напряжений K_{IC} , на который оказывает влияние квадруполь $\pm\Omega$ -дисклинаций, возникший в результате зарождения нанодвойника. В результате критическое условие роста трещины имеет следующий вид:

$$K_I^\sigma = K_{IC}. \quad (5)$$

где $K_{IC} = \sqrt{(K_{IC}^\sigma)^2 - (k_{IC}^q)^2} - k_{IC}^q$, $k_{IC}^q = k_I^q|_{K_I^\sigma=K_{IC}}$, $k_{IC}^q = k_{II}^q|_{K_I^\sigma=K_{IC}}$ и

$K_{IC}^\sigma = \sqrt{4G\gamma_e/(1-\nu)}$ – критическое значение коэффициента интенсивности напряжений в случае хрупкого разрушения, то есть в случае отсутствия квадруполя $\pm\Omega$ -дисклинаций. Рассчитаем отношение K_{IC}/K_{IC}^σ критических значений коэффициентов интенсивности напряжений. Зарождение нанодвойника *ABEF* повышает трещиностойкость материала, если $K_{IC}/K_{IC}^\sigma > 1$ и снижает, если $K_{IC}/K_{IC}^\sigma < 1$.

Карта уровней отношений критических значений K_{IC}/K_{IC}^σ коэффициентов интенсивности напряжений в координатах (d, h) представлен на Рис. 12 для случая внутризеренной трещины в нанокристаллическом Ni при $\gamma_e = 1,725 \text{ мДж/м}^2$ и $\alpha = 70^\circ$. Пунктирная линия на Рис. 12 описывает формоизменение нанодвойника

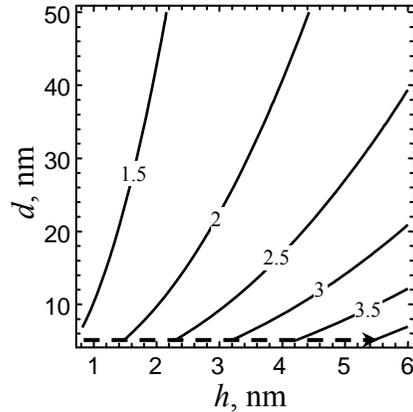


Рис. 12. Карта безразмерного критического значения K_{IC}/K_{IC}^σ коэффициента интенсивности напряжений в координатах (d, h) .

$ABEF$, которое соответствует наибольшему возможному значению отношения K_{IC} / K_{IC}^{σ} . Другими словами, такое формоизменение нанодвойника локально максимально повышает трещиностойкость материала. Из зависимостей на Рис. 12 видно, что трещиностойкость материала повышается с увеличением толщины двойника h и уменьшением размера зерна d .

Таким образом, зарождение и эволюция деформационных нанодвойников вблизи вершин трещин в деформируемых нанокристаллических материалах может эффективно реализовываться за счет идеальных наноскопических сдвигов (Рис. 11). Зарождение таких нанодвойников и связанной с ними дисклинационной структуры вблизи вершин трещин снижает высокие локальные напряжения, действующие около этих вершин, увеличивая вязкость разрушения хрупких нанокристаллических материалов и, как следствие, может служить эффективным механизмом повышения трещиностойкости таких наноматериалов.

В **третьей главе** разработаны теоретические модели новых механизмов релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках. Основным механизмом релаксации напряжений несоответствия в монокристаллических и поликристаллических пленках является образование ансамблей дислокаций несоответствия на границе раздела пленки с подложкой [Гольдштейн, Сарычев, ДАН **381** (2001) 770]. При этом, в экспериментальных работах отмечается, что уровень напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках (покрытиях) существенно ниже по сравнению с таковым в обычных монокристаллических и поликристаллических пленках (покрытиях) [Kabacoff, *Nanostructured Films and Coatings*, Kluwer, Dordrecht (2000) 373; Akbari *et al*, *Rev. Adv. Mater. Sci.* **15** (2007) 111]. Данный экспериментально установленный факт может быть связан с наличием большого числа границ зерен в нанокристаллических пленках, поскольку такие границы имеют свойства, которые существенно отличаются от свойств объемной кристаллической фазы, и способны задавать специфические для нанокристаллического состояния микромеханизмы релаксации напряжений несоответствия.

В п. 3.1 предложена теоретическая модель нового механизма релаксации напряжений несоответствия за счет реализации межзеренного скольжения, которое сопровождается образованием ансамбля диполей дисклинаций (ротационных дефектов). Такие диполи создают поля упругих напряжений, которые частично компенсируют напряжения несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Рассмотрим систему пленка–подложка, которая состоит из нанокристаллической пленки толщиной H и полубесконечной кристаллической подложки. Граница между пленкой и подложкой характеризуется дилатационным параметром несоответствия $f = (a_f - a_s) / a_f$, где a_f и a_s – параметры кристаллической решетки пленки и подложки, соответственно. Вследствие различия между параметрами кристаллических решеток подложки и пленки в пленке присутствуют напряжения несоответствия. В рамках

предлагаемой модели, в пленке происходит межзеренное скольжение, что приводит к образованию диполей зернограницных дисклинаций, обладающих мощностью $\pm\omega$ и образующих периодическую структуру с периодом p (Рис. 13). Зарождение такого ряда диполей дисклинаций несоответствия, характеризуется разностью ΔW энергий (на единицу площади сечения пленки, параллельного ее свободной поверхности) системы пленка–

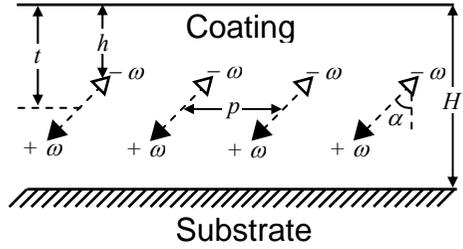


Рис. 13. Модель системы пленка–подложка с периодически распределенными диполями зернограницных $\pm\omega$ -дисклинаций.

подложка в состоянии с периодическим рядом дисклинационных диполей и в исходном бездефектном состоянии. Зарождение ряда диполей является энергетически выгодным в случае $\Delta W < 0$. Разность полных энергий системы пленка/подложка определяется следующей формулой:

$$\Delta W = \frac{D\omega^2 L^2}{2p} \left\{ \cos^2 \alpha + \frac{1}{2} \ln \frac{L^2 \sin^2 \alpha + 4t^2}{L^2} - \frac{8\pi(1+\nu)ft \cos \alpha}{\omega L} + \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{i-1} \left(\frac{2h_i h'_i}{L} + \frac{(h_i - h'_i)^2 - (jp + pi)}{2L} \ln \frac{(h_i - h'_i)^2 - (jp + pi)}{(h_i + h'_i)^2 - (jp + pi)} \right) \right\}, \quad (6)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, $h_1 = h_2 = h'_1 = h'_2 = h$; $h_3 = h_4 = h'_3 = h'_4 = h + L \cos \alpha$, $p_1 = p_3 = 0$, $p_{2,4} = \pm L \sin \alpha$, $t = h + (L/2) \cos \alpha$. Используя формулу (6), рассчитаем условия, при которых у дисклинаций диполя существует положение устойчивого равновесия, а также соответствующее равновесное плечо диполя. Равновесное плечо $L = L_e$ рассчитывается из условия $(\partial \Delta W / \partial L)|_{L=L_e} = 0$.

Равновесное плечо L_e также должно удовлетворять условию $(\partial^2 \Delta W / \partial^2 L)|_{L=L_e} > 0$, при котором положение равновесия дисклинаций

диполя является устойчивым. На Рис. 14 представлены оценки равновесной длины L_e плеча дисклинационных диполей в зависимости от величины угла α при различных значениях мощности ω дисклинационных диполей для систем AlN/6H-SiC (Рис. 14а) и GaN/6H-SiC (Рис. 14б) при $p = 30$ nm, $H = 30$ nm и $h = H/2$. Поскольку дефектная конфигурация симметрична относительно плоскости с $\alpha = 0^\circ$, то на Рис. 14 рассматривается интервал углов $0^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$. Из зависимостей $L_e(\alpha)$ (Рис. 14) следует, что уменьшение мощности ω дисклинационных диполей увеличивает значение равновесного плеча L_e дисклинационных диполей. При определенных значениях углов α ($\alpha > 45^\circ$) и мощности ω (при $\omega = 5^\circ$ для AlN/6H-SiC (Рис. 14а), и $\omega = -10^\circ$ и

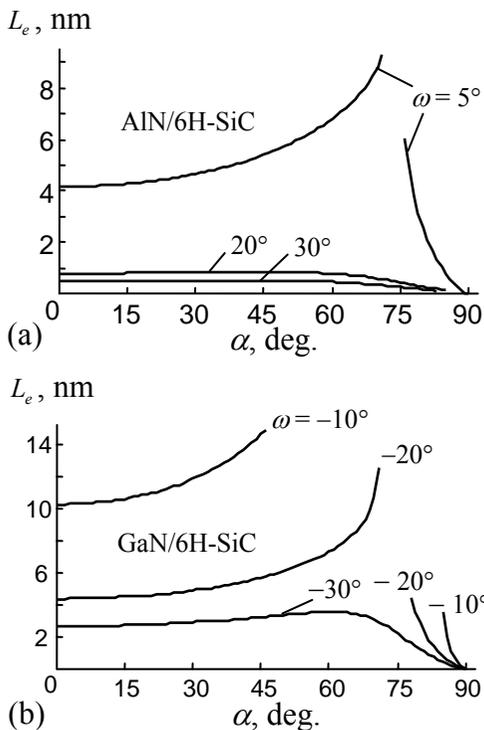


Рис. 14. Равновесное плечо L_e дисклинационных диполей как функция угла α при различных значениях мощности ω дисклинационных диполей для систем пленка–подложка AlN/6H-SiC (a) и GaN/6H-SiC (b).

растягивающие или сжимающие напряжения σ_f в пленке действуют в плоскости, параллельной ее свободной поверхности, и складываются из напряжений несоответствия и дополнительных напряжений, возникающих в пленке в результате пластической деформации. В первом приближении напряжения σ_f можно представить в виде:

$$\sigma_f = \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)}(f - \varepsilon_c), \quad (7)$$

где G и ν – модуль сдвига и коэффициент Пуассона материала пленки соответственно, а ε_c – усредненная пластическая деформация растяжения или сжатия в плоскости, параллельной свободной поверхности пленки.

–20° для GaN/6H-SiC (Рис. 14b)) на кривых $L_e(\alpha)$ имеются разрывы, которые соответствуют режиму неограниченного роста плеч дисклинационных диполей.

В п. 3.2 разработана теоретическая модель, которая описывает новый, специфический для нанокристаллического состояния микромеханизм релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках, а именно релаксацию напряжений несоответствия посредством ускоренного диффузионного массопереноса по границам зерен. Рассмотрим систему «пленка–подложка», состоящую из нанокристаллической пленки толщиной H и полубесконечной монокристаллической подложки, граница между которыми характеризуется дилатационным несоответствием $f = (a_s + a_f)/a_f$

(Рис. 15). Будем предполагать, что внутренние растя-

Пластическая деформация посредством диффузионного массопереноса по границам зерен (называемая деформацией Кобла [Coble, J. Appl. Phys. **34** (1963) 1679]) вносит значимый вклад в пластическую деформацию массивных нанокристаллических образцов, особенно при низких скоростях пластического деформирования и повышенных температурах [Masumura *et al*, Acta Mater. **46** (1998) 4527]. В случае $f < 0$, изображенном на Рис. 15, рассматриваемая деформация (деформация Кобла) приводит к удлинению зерен в вертикаль-

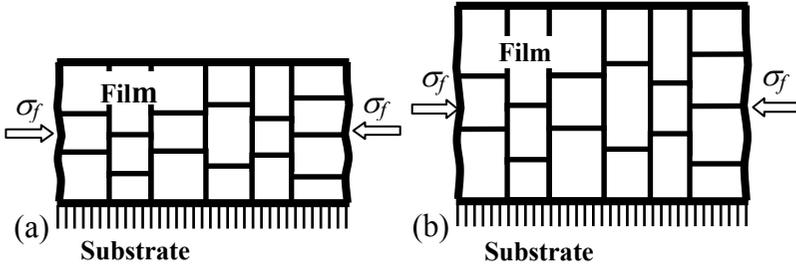


Рис. 15. Релаксация напряжений несоответствия в нанокристаллической пленке посредством ускоренного диффузионного массопереноса по границам зерен (схематично).

ном направлении (перпендикулярном межфазной границе «пленка–подложка») за счет типичного для деформации Кобла массопереноса с боковых вертикальных граней зерен на горизонтальные грани (параллельные межфазной границе «пленка–подложка»). Такой массоперенос фактически приводит к зарождению зернограничных дислокаций несоответствия, которые вызывают, по меньшей мере, частичную релаксацию напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. После ряда вычислений была получена формула для средней деформации $\bar{\varepsilon}_c$, вызванной диффузией по границам зерен (диффузией по Коблу) в нанокристаллической пленке, которая определяется деформацией $\varepsilon_c(V)$ в каждом отдельном зерне и логнормальным распределением $f(V)$ зерен по размерам:

$$\bar{\varepsilon}_c = \frac{1}{m_V} \int_0^{\infty} \varepsilon_c(V) V f(V) dV, \quad (8)$$

где $f(V) = \frac{1}{V\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left[-\frac{(\ln V - m_{\ln V})^2}{2s^2}\right]$, $\varepsilon_c(V) = f[1 - \exp(-At)]$,

$A = \frac{28G\pi(1+\nu)}{k_B T(1-\nu)V} D_{gb}$, $V = d^3$ – объем зерна, t – время, $m_{\ln V}$ и s – соответ-

ственно среднее значение и среднеквадратичное отклонение $\ln V$. В рамках нашей модели диффузионный массоперенос по границам зерен приводит к релаксации напряжений несоответствия. Количественно это выражается в уменьшении абсолютного значения эффективного несоответствия

$f_{eff} = f - \bar{\varepsilon}_c$. Построим зависимость модуля $|f_{eff}|$ эффективного несоответствия от времени t для металлической системы Ni/Cu при различных значениях среднего размера \bar{d} зерен. Как следует из Рис. 16, в системе Ni/Cu со средними размерами зерен нанокристаллической пленки Ni, равными 10–30 nm, зернограничная диффузия в никелевой пленке при комнатной температуре может практически полностью снять напряжения несоответствия уже в течение нескольких минут даже секунд. В частности при $d=10$ nm исходное эффективное несоответствие уменьшается в 5 раз уже через 20 секунд, а при $d=30$ nm – через 10 минут после начала диффузии.

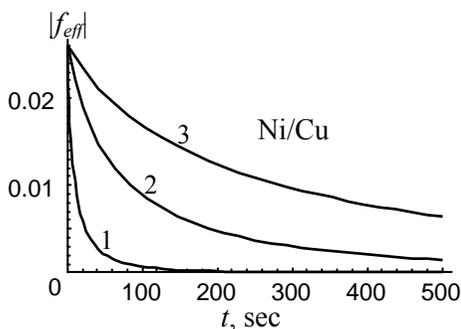


Рис. 16. Зависимости абсолютной величины $|f_{eff}|$ эффективного несоответствия от времени t для нанокристаллической системы Ni/Cu при различных значениях среднего размера зерна $\bar{d} = 10$ (1), 20 (2) и 30 (3) nm.

В п. 3.3 сформулированы выводы по результатам, полученным в главе 3. Согласно этим результатам, процесс зарождения дисклинационных диполей при межзеренном скольжении и ускоренный диффузионный массоперенос по границам зерен являются эффективными механизмами релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях.

Четвертая глава посвящена исследованию влияния наномасштабной пластической деформации на зарождение и рост трещин в нанокристаллических твердых телах. Низкая трещиностойкость нанокристаллических материалов связывается с подавлением обычных микромеханизмов торможения трещин (прежде всего, торможения трещин за счет их затупления при испускании дислокаций из вершин трещин), вследствие особенностей нанокристаллической структуры [Goldstein, Morozov, Phys. Mesomech. **10** (2007) 235]. Вместе с тем, известны несколько примеров получения высокопрочных нанокристаллических керамик с достаточно высокими показателями трещиностойкости [Pei *et al*, Acta Mater. **53** (2005) 4505; Zhao *et al*, Appl. Phys. Lett. **84** (2004) 1356]. Природа сочетания высокой прочности и функциональной трещиностойкости таких нанокристаллических керамик экспериментально не идентифицирована и является предметом интенсивных дискуссий [Andrievski, Rev. Adv. Mater. Sci. **22** (2009) 1; Mukhopadhyay, Basu, Int. Mater. Rev. **52** (2007) 257]. Доминируют представления о том, что, несмотря на подавление обычных микромеханизмов торможения трещин, в некоторых нанокристаллических материалах эффективно действуют специфические (для наноструктур) микромеханизмы торможения трещин. Таковыми микромеха-

низмами, в частности, являются торможение трещин за счет эффектов локальной миграции границ зерен [Morozov *et al*, Phys. Mech. Mater. **8** (2009) 155], ротационной деформации [Morozov *et al*, J. Mech. Phys. Solids **58** (2010) 1088], межзеренного скольжения [Bobylev *et al*, Int. J. Plasticity **26** (2010) 1629], а также комбинированного действия межзеренного скольжения и поворотов зерен [F. Yang, W. Yang, J. Mech. Phys. Solids **57** (2009) 305]. В п. 4.1 построена теоретическая модель нового специфического микромеханизма торможения трещин в нанокристаллических материалах, а именно торможение за счет зарождения наноскопических зерен вблизи вершин трещин. Рассмотрим нанокристаллический образец со средним размером зерна d , содержащий трещину I типа и находящийся под действием внешней одноосной

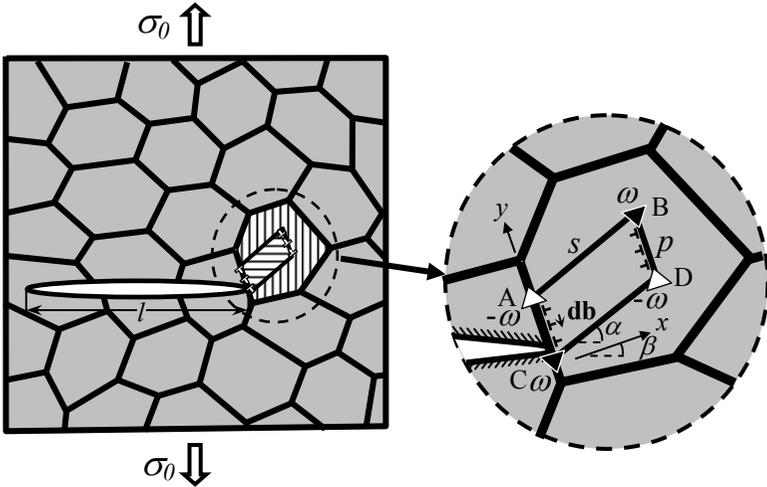


Рис. 17. Зарождение нового нанозерна, имеющего форму параллелограмма и, связанной с ним, дефектной структуры вблизи вершины трещины в деформируемом нанокристаллическом твердом теле (схематично).

растягивающей нагрузки σ_0 (Рис. 17). Пусть σ_{ij}^c - есть поле напряжений, создаваемое внешней нагрузкой σ_0 в материале с трещиной. Предполагается, что действие компоненты σ_{xy}^c сдвигового напряжения может привести к зарождению нового зерна наноскопического размера вблизи вершины трещины (Рис. 17). В рамках модели, зарождение нанозерен является специфическим микромеханизмом деформации, который реализуется в три этапа: (i) расщепление границы зерна (на неподвижную границу AC и подвижную границу BD); (ii) миграция границы зерна BD ; (iii) образование двух новых границ зерен AB и CD (Рис. 17). Миграция зерен связана с пластическим сдвигом в наноскопической области, окруженной пластически недеформированным материалом, которому препятствует этот окружающий материал. В результате пластический сдвиг является незавершенным и приводит к образованию пластической

несовместности и соответствующих упругих полей, которые эффективно моделируются как упругие поля двух диполей клиновых дисклинаций с мощностями $\pm\omega$ (Рис. 17). Новое зерно $ABCD$ может иметь форму прямоугольника или параллелограмма в зависимости от формы области, «заметаемой» границей BD при ее миграции. Зарождение нанозерна (Рис. 17) характеризуется разностью энергий $\Delta W = W_2 - W_1$, где W_1 – энергия системы в начальном состоянии, содержащем только трещину, W_2 – энергия системы в конечном состоянии, содержащем трещину и новое наноскопическое зерно (нанозерно). Зарождение нанозерна энергетически выгодно при выполнении условия $\Delta W < 0$. Далее было произведено вычисление выражения для разности энергий ΔW и анализ зависимости разности энергии от параметров системы. В

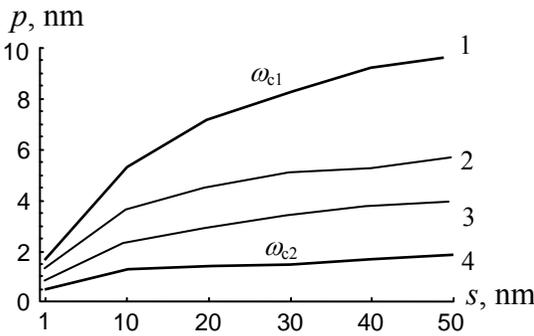


Рис. 18. Зависимость равновесного значения размера p_{eq} от размера s нанозерна при различных значениях мощности ω дисклинаций $\omega = 2, 7, 11$ и 14° (кривые 1, 2, 3 и 4, соответственно).

результате из расчетов зависимостей $\Delta W(\alpha)$ следует, что зарождение нового нанозерна $ABCD$ является наиболее энергетически выгодным вдоль направления задаваемого углом $\alpha = 70^\circ$. Данный угол соответствует направлению действия максимального сдвигового напряжения вблизи вершины трещины нормального отрыва в твердом теле под действием растягивающей нагрузки. Проведя минимизацию зависимостей $\Delta W(s, p)$, были определены равновесные значения размера $p = p_{eq}$, которые задают равновесную форму нанозерна при заданном значении размера s . На Рис. 18 представлены зависимости $p_{eq}(s)$ при различных значениях мощности ω дисклинаций. Из зависимостей на Рис. 18 следует, что равновесная форма нового нанозерна стремится к форме сильно вытянутого параллелограмма с отношением сторон $s/p_{eq} \gg 1$. Следует отметить, что образование нового нанозерна и соответствующей дисклинационной конфигурации энергетически выгодно, если мощность дисклинаций ω находится внутри интервала $\omega_{c1} \leq \omega \leq \omega_{c2}$. Кривые 1 и 4 на Рис. 18 задают нижний и верхний критические уровни мощности дисклинаций: $\omega_{c1} = 2^\circ$ и $\omega_{c2} = 14^\circ$, соответственно.

Рассмотрим, какое влияние оказывает зарождение нового нанозерна вблизи вершины трещины на дальнейшее развитие этой трещины в нанокристаллическом материале. Трещина в твердом теле характеризуется критической

длиной (длиной Гриффитса), определяемой как минимальная длина, при которой начинается катастрофический рост трещины при заданном уровне напряжений. Чем больше критическая длина трещины, тем меньше вероятность ее перехода в режим катастрофического роста. Рассчитаем критическую длину l_c внутризеренной трещины I типа, которая развивается под действием суперпозиции внешней нагрузки σ_0 и поля напряжений конфигурации дефектов (которая представляет собой дисклинационные диполи и дислокационные ряды AC и BD (Рис. 17)). Для расчета воспользуемся силовым критерием: $K_I(l=l_c) = K_{IC}$, где K_I – коэффициент интенсивности напряжений, рассчитываемый по формуле:

$$K_I(l) = \sqrt{\frac{2}{\pi l}} \int_0^l \sigma_{yy}(x, y=0) \sqrt{\frac{x}{l-x}} dx, \quad (9)$$

здесь σ_{yy} – компонента тензора напряжений, создаваемых внешней нагрузкой и дефектной конфигурацией в отсутствие трещины, $K_{IC} = \sqrt{4\gamma G/(1-\nu)}$, – критическое значение коэффициента интенсивности напряжений, γ – удельная энергия (на единицу площади) свободной поверхности трещины.

В частном случае $\omega = 0$ и $\sigma_{yy}(x, y) = \sigma_0$ мы получаем известное выражение для критической длины $l'_c = l_c(\omega = 0)$ трещины нормального отрыва, раскрывающейся только под действием внешней растягивающей нагрузки: $l'_c = 8G\gamma/\pi(1-\nu)\sigma_0^2$. Отношение l_c/l'_c численно описывает влияние зарождения нового нанозерна (Рис. 19) на рост трещины. Формирование нового нанозерна повышает трещиностойкость материала, если отношение $l_c/l'_c > 1$ и снижает трещиностойкость, если отношение $l_c/l'_c < 1$. Из зависимостей $l_c/l'_c(\omega)$, приведенных на Рис. 19

на примере нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, видно, что критическая длина трещины растет или, другими словами, трещиностойкость повышается с увеличением мощности ω дисклинаций и/или уменьшением размера s нанозерна. Таким образом, зарождение новых нанозерен вблизи вершин трещин представляет собой особый (в частности, специфический для нанокристаллических структур) микромеханизм повышения трещиностойкости нанокристаллических материалов.

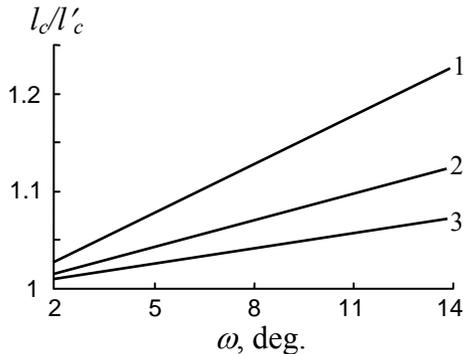


Рис. 19 Зависимости отношения l_c/l'_c критических длин трещины от мощности ω дисклинаций, при значениях размера нанозерна $s = 10$ (1), 20(2) и 30(3)nm.

В п. 4.2 предложена теоретическая модель нового механизма пластической деформации, а именно зарождение цепочек нанозерен с малоугловыми и/или специальными границами зерен внутри относительно больших зерен, имеющих высокоугловые границы. Реализация этого механизма подтверждается экспериментальными наблюдениями [Champion *et al*, Science **300** (2003) 310]. В рамках нашей модели, предполагается, что под действием внешнего сдвигового напряжения τ зарождается новое зерно $ABCD$ наноскопического размера, моделируемого прямоугольником со сторонами L и s , которые также являются плечами квадруполья клиновых дисклинаций мощностью $\pm\omega_0$ ($\pm\omega_0$ -дисклинаций) (Рис. 20). Зарождение второго нанозерна $CDEF$ вблизи ранее зародившегося нанозерна $ABCD$ происходит в результате расщепления границы зерна CD на неподвижную границу CD (расположенную в том же месте) и подвижную границу EF , которая мигрирует на расстояние p (Рис. 20). Миграция границы EF , сопровождается образованием двух новых границ зерен CE и DF (Рис. 20). Точки E и F подвижной границы EF содержат кли-

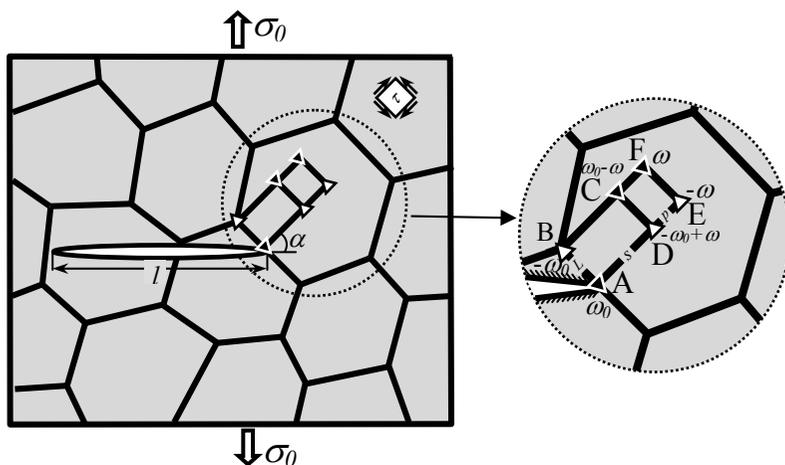


Рис. 20. Образец с мелкозернистой структурой, находящийся под действием механической нагрузки, содержащий трещину I типа и цепочку наноскопических зерен, которая состоит из двух нанозерен $ABCD$ и $CDEF$.

новые дисклинации с мощностью $\pm\omega$ ($\pm\omega$ -дисклинаций), которые образуются в результате расщепления исходных $\pm\omega_0$ -дисклинаций (Рис. 20). Рассмотрим, энергетические характеристики трансформации дефектной конфигурации, представленной на Рис. 20. Расчет энергетических характеристик показал, что зарождения второго нанозерна энергетически выгодно, когда расстояние s между границами зерен AB и CD $s = s_0 \approx 37$ nm при мощности ω отщепившегося диполя $\pm\omega$ -дисклинаций $\omega = \omega' \approx 5^\circ$ для α - Al_2O_3 и

$s = s_0 \approx 31 \text{ nm}$ при $\omega = \omega' \approx 14^\circ$, для Al. В обоих случаях, когда расстояние s (при условии, что $s > s_0$) увеличивается, это приводит к расширению интервала значений дисклинационной мощности ω , при которых процесс зарождения нового нанозерна $CDEF$ энергетически выгоден.

Рассмотрим, какое влияние оказывает зарождение простейшей цепочки наноскопических зерен, состоящей из двух нанозерен $ABCD$ и $CDEF$ (Рис. 20), вблизи вершины трещины на дальнейшее развитие этой трещины в нанокристаллическом материале. Расчет критической длины l_c трещины аналогичен приведенному в п. 4.1. Вследствие этого сразу перейдем к анализу зависимостей $l_c/l'_c(p, \omega)$, который показал, что критическая длина трещины растет с уменьшением размера p нанозерна $CDEF$ и с увеличением мощности ω дисклинаций. Например, в случае нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и мощности дисклинаций $\omega = 10^\circ$ отношение $l_c/l'_c(p, \omega) \approx 1.07, 1.05$ и 1.04 при $p = 10, 20$ и 30 nm , соответственно. Тогда, как в случае нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и мощности дисклинаций $\omega = 20^\circ$ отношение $l_c/l'_c(p, \omega) \approx 1.16, 1.11$ и 1.08 при $p = 10, 20$ и 30 nm , соответственно. Из приведенных оценок следует, что зарождение цепочки вытянутых нанозерен вблизи вершины трещины способно повысить трещиностойкость нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ на 5–15%.

Из результатов, полученных в п. 4.2, следует, что зарождение цепочки из двух наноскопических зерен вблизи вершины трещины приводит к торможению роста этих трещин в нанокристаллических твердых телах. Этот результат может быть обобщен на более длинные цепочки нанозерен. Таким образом, рассмотренный в данной работе микромеханизм зарождения цепочек нанозерен вблизи вершин трещин является новым особым (реализующимся только в некоторых наноматериалах) механизмом повышения трещиностойкости нанокристаллических керамик.

В заключении приведен перечень основных результатов и сформулированы основные выводы диссертации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе получены следующие **основные результаты**:

- 1 Построена модель механизма совместного действия межзеренного скольжения и ротационной деформации под действием внешнего напряжения и определено условие перехода от межзеренного скольжения к ротационной деформации (вращению зерен как целого) в нанокристаллических твердых телах;
- 2 Построена модель механизма аккомодации межзеренного скольжения за счет решеточного скольжения дислокаций, испускаемых границами зерен, и исследована конкуренция между эмиссией решеточных дислокаций из

границ зерен и зарождением нанотрещин в нанокристаллических твердых телах;

- 3 Построены модели механизмов упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических твердых телах при сверхпластической деформации, рассчитаны критические напряжения, необходимые для реализации межзеренного скольжения, аккомодированного решеточным скольжением, вблизи тройных стыков границ зерен, построена теоретическая зависимости напряжения течения от степени пластической деформации;
- 4 Построены модели механизмов зарождения деформационных нанодвойников на границах зерен и вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах, и исследовано влияние зарождения нанодвойников вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических материалов;
- 5 Построены модели механизмов релаксации напряжений в нанокристаллических пленках и подложках за счет действия межзеренного скольжения и диффузионного массопереноса по границам зерен;
- 6 Построены модели механизмов зарождения новых наноскопических зерен внутри больших зерен вблизи вершин трещин и исследовано влияния образования таких нанозерен и их цепочек вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел.

Полученные основные результаты позволяют сделать основной вывод, что цель диссертации достигнута – разработаны теоретические модели, которые достоверно описывают существующие экспериментальные данные и являются новыми и важными, для понимания фундаментальных основ взаимодействия механизмов пластической деформации и их влияния на зарождение и рост трещин в нанокристаллических твердых телах.

Основные положения диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Н.В. Скиба. Зернограничные механизмы релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и подложках // Физика и механика материалов, том 19, № 1, с. 68-87, 2014.
2. N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Plastic flow through widening of nanoscale twins in ultrafine-grained metallic materials with nanotwinned structures // Rev. Adv. Mater. Sci., Vol. 37, N1, p.29-36, 2014.
3. I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Nanotwins induced by grain boundary deformation processes in nanomaterials // Scripta Materialia, Vol. 71, p.33-36, 2014.
4. Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Влияние зарождения цепочек наноскопических зерен вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических керамик // Доклады Академии наук, том 405, № 4, с. 630-633, 2013.
5. Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, Н.В. Скиба, А.Г. Шейнерман. Влияние зарождения нанодвойников вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических керамик // Доклады Академии наук, том 453, № 6, с. 413-416, 2013.

6. I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Formation of nanoscopic grains due to dislocation pile-up transformations in deformed ultrafine-grained materials // *Rev. Adv. Mater. Sci.*, Vol. 35, p.96-103, 2013.
7. N.F.Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba, A.G. Sheinerman. Formation of deformation twins through ideal nanoshear events near crack tips in deformed nanocrystalline materials // *Rev. Adv. Mater. Sci.*, Vol. 32, N1, p.75-81, 2012.
8. I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials // *Scripta Materialia*, Vol. 67, N1, p.13-16, 2012.
9. I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman and N.V. Skiba. Elongated nanoscale voids at grain boundaries in nanocrystalline materials // *Acta Materialia*, Vol. 59, P. 678-85, 2011.
10. N.F.Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Stress-driven formation of nanograin chains in nanocrystalline and ultrafine-grained materials // *Rev. Adv. Mater. Sci.*, Vol. 29, N1, p.180-186, 2011.
11. И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Процессы зарождения новых наноскопических зерен вблизи вершин трещин в деформируемых нанокристаллических материалах // *Физика и механика материалов*, том 11, № 2, с. 105-177, 2011.
12. D.A.Indeitsev, N.F.Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Nucleation of nanoscale voids at disclination quadrupoles in deformed nanocrystalline materials // *Rev. Adv. Mater. Sci.*, Vol. 26, No. 1/2, P. 91-7, 2010.
13. I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba, A.K. Mukherjee. Nucleation of nanograins near cracks in nanocrystalline materials // *Scripta Materialia*, Vol. 62, P. 387-90, 2010.
14. И.А. Овидько, Н.В. Скиба, А.Г. Шейнерман. Релаксация напряжений несоответствия путем зернограницной диффузии в нанокристаллических пленках // *Физика и механика материалов*, том 8, № 2, с. 149-154, 2009.
15. Н.В. Скиба, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман. Диполи дисклинаций несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях // *ФТТ*, т. 51, №2, с. 265-70, 2009.
16. M.Yu Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko and N.V. Skiba. Giant faults in deformed Gum Metal // *Int. J. Plasticity*, Vol. 24, No. 8, P. 1333-59, 2008.
17. M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Crack-stimulated generation of deformation twins in nanocrystalline metals and ceramics // *Philosophical Magazine*, Vol. 88, No. 8, P. 1137-51, 2008.
18. И.А. Овидько, Н.В. Скиба, А.Г. Шейнерман. Влияние зернограницного скольжения на трещиностойкость нанокристаллических керамик // *ФТТ*, т. 50, №7, с. 1211-15, 2008.
19. I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, N.V. Skiba. Stress relaxation through interfacial sliding in nanocrystalline films // *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 20, P. 1-7, 2008.
20. М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Влияние включений на гетерогенное зарождение трещин в нанокompозитных материалах // *ФТТ*, т. 49, №2, с. 252-57, 2007.

21. М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Механизм образования деформационных двойников в нанокристаллических материалах // ФТТ, т. 49, №5, с. 830-38, 2007.
22. I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, N.V. Skiba. Stress relaxation through local migration of interfaces in nanocrystalline coatings // Rev. Adv. Mater. Sci., Vol. 16, P. 102-7, 2007.
23. М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Generation of deformation twins in nanocrystalline metals: Theoretical model // Phys. Rev. B, Vol. 74, No. 21, 2006.
24. М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Emission of partial dislocations from triple junctions of grain boundaries in nanocrystalline materials // J. Phys. D: Appl. Phys., Vol. 38, P. 3921-3925, 2005.
25. М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Generation of nanocracks at grain boundary disclinations in nanocomposite materials // Rev. Adv. Mater. Sci., Vol. 10, N5, P. 483-389, 2005.
26. B. Baretzky, M.D. Baro, G.P. Grabovetskaya, J. Gubicza, M.B. Ivanov, Yu.R. Kolobov, T.G. Langdon, J. Lendvaij, A.G. Lipnitskii, A.A. Mazilkin, A.A. Nazarov, J. Nogues, I.A. Ovidko, S.G. Protasova, G.I. Raab, A. Revesz, N.V. Skiba, J. Sort, M.J. Starink, B.B. Straumal, S. Surinach, T. Ungar and A.P. Zhilyaev. Fundamentals of Interface Phenomena in Advanced Bulk Nanoscale Materials // Rev. Adv. Mater. Sci., Vol. 9, N1, P. 45-108, 2005.
27. М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Зернограничное скольжение и эмиссия решеточных дислокаций в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации // ФТТ Том. 47, Вып. 6, 2005.
28. М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Strengthening and softening mechanisms in nanocrystalline materials under superplastic deformation // Acta Materialia Vol. 52, No. 6, P. 1711-1720, 2004.
29. М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба Эмиссия частичных дислокаций границами зерен в нанокристаллических металлах // ФТТ Том. 46, Вып. 11. С. 2042-2052, 2004.
30. М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Strengthening mechanism for high-strain-rate superplasticity in nanocrystalline materials // Journal of Physics D: Applied Physics. Vol. 36, No. 12, P. L47-L50, 2003.
31. I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, N.V. Skiba Competing relaxation mechanisms in strained semiconducting and superconducting films // Journal of Physics: Condensed Matter Vol. 15, No. 8, P. 1-9, 2003.
32. М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Crossover from grain boundary sliding to rotational deformation in nanocrystalline materials // Acta Materialia Vol. 51, No. 14, P. 4059-71, 2003.
33. М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Transformations of grain boundary due to disclination motion and emission of dislocation pairs, Materials Science and Engineering A, Vol. 339, No. 1-2, P. 73-80, 2003.
34. М.Ю. Gutkin, A.L. Kolesnikova, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Disclinations and rotational deformation in fine-grained materials // Philosophical Magazine Letters Vol. 82, No. 12, P. 651-7, 2002.

35. M.Yu. Gutkin, A.L. Kolesnikova, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Rotational deformation mechanism in fine-grained materials prepared by severe plastic deformation // *J. Metast. Nanocryst. Mater.*, Vol. 12, P. 47-57, 2002.
36. М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Изменение разориентировок границ зерен при эмиссии пар дислокаций // *Письма в ЖТФ*, Том. 28, Вып. 10, С. 78-82, 2002.

Благодарности

Соискатель ученой степени выражает благодарность за предоставление грантов: Министерству образования и науки РФ (грант 14.В25.31.0017, задание № 9.1964.2014К, контракты 8025 и 14.740.11.0353, гранты Президента РФ МК-5122.2007.1 и МК-5600.2011.1), Санкт-Петербургскому государственному университету (исследовательский грант 6.37.671.2013) и РФФИ (грант 12-02-31642-мол-а).