

Скиба Николай Васильевич

**Взаимодействие мод пластической деформации
и их влияние на зарождение и рост трещин в
нанокристаллических твердых телах**

01.04.02 – Механика деформируемого твердого тела
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант
доктор физ.-мат. наук
И.А. Овидько

Санкт-Петербург
2014

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ГЛАВА 1. Взаимодействие мод деформации и аккомодации при пластическом и сверхпластическом деформировании нанокристаллических твердых тел.....	15
1.1 Взаимодействие межзеренного скольжения и ротационной деформации при пластическом деформировании нанокристаллических твердых тел.....	16
1.1.1 Совместное действие межзеренного скольжения и ротационной деформации.....	17
1.1.2 Переход от межзеренного скольжения к ротационной деформации..	27
1.1.3 Резюме.....	36
1.2 Аккомодация межзеренного скольжения за счет испускания решеточных дислокаций из границ зерен в деформируемых нанокристаллических твердых телах.....	38
1.2.1 Модель испускания частичной дислокации из границы зерна.....	39
1.2.2 Сравнение энергетической выгоды испускания частичной дислокации с зарождением нанотрещины.....	44
1.2.3 Резюме.....	46
1.3 Особенности межзеренного скольжения при сверхпластической деформации нанокристаллических твердых тел.....	48
1.3.1 Трансформации зернограничных дислокаций на тройных стыках границ зерен.....	50
1.3.2 Испускание решеточных дислокаций тройным стыком границ зерен.....	61
1.3.3 Зависимость напряжения течения от общей пластической деформации.....	73
1.3.4 Резюме.....	77

ГЛАВА 2. Зарождение деформационных двойников на границах зерен и вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах.....79

2.1	Механизм зарождения деформационного нанодвойника вблизи диполя зернограницных дисклинаций и трещины в нанокристаллических твердых телах.....	80
2.1.1	Образование нанодвойника за счет эмиссии частичных дислокаций из границы зерна вблизи дисклинационного диполя.....	81
2.1.2	Образование нанодвойника за счет эмиссии частичных дислокаций из границы зерна вблизи вершины трещины.....	96
2.1.3	Резюме.....	104
2.2	Зарождения деформационных нанодвойников за счет идеальных сдвигов вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах	105
2.2.1	Модель образования нанодвойника за счет идеальных сдвигов вблизи вершины трещины.....	105
2.2.2	Влияние образования нанодвойника вблизи вершины трещины на трещиностойкость нанокристаллического материал.....	112
2.2.3	Резюме.....	115
	Приложение А.....	116

ГЛАВА 3. Зернограницные моды наномасштабной пластической деформации и их взаимодействие в нанокристаллических пленках.....120

3.1	Диполи дисклинаций несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях.....	121
3.1.1	Модель образования дисклинационных диполей в системе пленка/подложка.....	121
3.1.2	Энергетические характеристики зарождения дисклинационных диполей в системе пленка/подложка.....	124

3.2	Релаксация напряжений несоответствия путем зернограничной диффузии в нанокристаллических пленках.....	132
3.3	Резюме.....	138
ГЛАВА 4. Влияние наномасштабной пластической деформации на		
зарождение и рост трещин в нанокристаллических твердых телах.....		
4.1	Зарождения новых наноскопических зерен вблизи вершин трещин в деформируемых нанокристаллических твердых телах.....	141
4.1.1	Условия образования нанозерна вблизи вершины трещины в нанокристаллических твердых телах.....	141
4.1.2	Влияние процесса образования новых нанозерен на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел.....	151
4.1.3	Резюме.....	154
4.2	Зарождение цепочек наноскопических зерен в деформируемых нанокристаллических твердых телах.....	155
4.2.1	Условия образования цепочек нанозерен в нанокристаллических твердых телах.....	155
4.2.2	Влияние процесса образования цепочек нанозерен на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел.....	162
4.2.3	Резюме.....	165
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....		166
ЛИТЕРАТУРА.....		170
Л.1	Список цитируемой литературы.....	170
Л.2	Список публикаций по теме диссертации.....	189

ВВЕДЕНИЕ

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 [1-36]. 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 металлы и керамики 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. Однако в последние годы были получены нанокристаллические материалы с одновременно высокими прочностными характеристиками и функциональной пластичностью при комнатной температуре и даже сверхпластичностью при относительно низких гомологических температурах [37-45]. Это открывает огромные перспективы прикладного использования таких нанокристаллических материалов, которые одновременно и сверхпрочны и сверхпластичны.

Нанокристаллические материалы представляют собой поликристаллические твердые тела с размерами зерен порядка нескольких десятков нанометров. На данный момент общеупотребительной является терминология, в соответствии с которой верхняя граница размера зерна для нанокристаллических твердых тел составляет около 100 nm [1-7]. 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, характеризуемой 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. Идентификация этих специфических механизмов пластической деформации является ключевой проблемой для понимания природы пластичности и трещиностойкости нанокристаллических твердых тел. Согласно современным представлениям о процессах пластического течения в нанокристаллических материалах, наряду с решеточным скольжением, в них также могут действовать следующие механизмы пластической деформации: межзеренное скольжение [37-45,56-61], ротационная мода деформации [51,52,62-70], диффузия по границам зерен и их тройным стыкам [71-78], деформация двойникованием [79-88].

Анализ экспериментальных исследований 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 неоднородности 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 удается 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 не развита; она находится в стадии становления. До последнего времени наибольшее внимание уделялось построению упругих моделей дефектов в наноструктурах в рамках классической теории упругости [3,6,46-50,89-92], дислокационно-

кинетического подхода [30-35], континуальной теории [93, 94], нелокальной [95,96] и градиентной [97,98] теорий упругости. Задача же приложения этих моделей к построению адекватной теории поведения нанокристаллических твердых тел при пластической деформации остается пока не решенной. 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 металлов и керамик с одновременно сверхвысокими прочностными характеристиками и функциональной пластичностью. Это обуславливает актуальность настоящей 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.

Работа выполнена на стыке двух специальностей – механики деформируемого твердого тела и физики конденсированного состояния. При формулировке моделей широко использовались физические представления о микроструктуре твердых тел. На этапе постановки и решения задач применялся хорошо развитый в рамках классической теории упругости (раздела механики деформируемого твердого тела) математический аппарат теории дефектов в упругой среде. Полученные результаты интерпретировались с помощью понятий, как механики деформируемого твердого тела, так и физики конденсированного состояния.

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.

Краткое содержание работы

Работа включает в себя введение, четыре главы основного текста, заключение и список литературы.

Во **введение** обоснована актуальность темы диссертации, сформулирована основная цель работы, кратко представлены содержание диссертации, сведения о ее апробации и основных публикациях по ее теме.

В **первой главе** рассматривается совместное действие механизмов зернограничного скольжения и ротационной деформации (вращения зерен) в нанокристаллических материалах при (сверх)пластической деформации и переход от зернограничного скольжения к вращению зерна. Также рассмотрено совместное действие механизмов зернограничного и решеточного скольжения при (сверх)пластической деформации нанокристаллических материалов. В п. 1.1 разработана теоретическая модель расщепления скользящих зернограничных дислокаций на переползающие зернограничные дислокации в тройном стыке границ зерен. Рассчитываются энергетические характеристики первого такого расщепления. В результате этих расчетов было установлено, что при больших углах (оптимальными являются углы близкие к 100°) происходит расщепление на переползающие дислокации. В рамках модели этот процесс расщепления зернограничных дислокаций на переползающие дислокации повторяется многократно, приводя к формированию конечных стенок переползающих дислокаций (описываемых четырьмя дисклинационными диполями, которые являются носителями ротационной деформации). Рассчитаны энергетические характеристики и критическое напряжение такой смены механизма деформации, величина которого определяется упругими свойствами материала, структурой границ зерен, размером и геометрией

нанозерна. В п. 1.2 рассмотрено решеточное скольжение дислокаций выпускаемых из границ зерен, которое выступает в роли механизма аккомодации межзеренного скольжения. В рамках этого подхода разработана теоретическая модель, описывающая конкуренцию процессов наномасштабной пластической деформации и разрушения в случае испускания частичных дислокаций границами зерен и зарождения нанотрещин на зернограницных дисклинациях, образовавшихся в результате межзеренного скольжения, в деформируемых нанокристаллических материалах. На примере нанокристаллического карбида кремния (SiC), деформируемого при высоких температурах, теоретически выявлено, что испускание дислокаций Шокли из границ зерен с диполями дисклинаций представляет собой энергетически выгодный процесс в определенных интервалах параметров дефектной структуры. Проведено сравнение энергетических характеристик конкурирующих процессов испускания частичных дислокаций и зарождения нанотрещин в полях напряжений диполей зернограницных дисклинаций. Показано, что в определенных условиях испускание частичных дислокаций служит эффективным каналом релаксации полей напряжений диполей дисклинаций и, тем самым, препятствует зарождению нанотрещин, повышая пластические свойства нанокристаллических материалов. В п. 1.3 предложена теоретическая модель, описывающая физические механизмы упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации. В рамках модели тройные стыки границ зерен являются препятствиями для скольжения зернограницных дислокаций – носителей зернограницного скольжения, что приводит к накоплению разностных дислокаций в тройных стыках границ зерен и упрочнению материала. При достижении вектором Бюргерса разностных дислокаций некоторого критического значения происходит испускание решеточных дислокаций из тройных стыков в прилегающие зерна, что инициирует решеточное скольжение. Локальная миграция тройных стыков в результате зернограницного скольжения и испускание решеточных дислокаций из тройных

стыков границ зерен приводит к разупрочнению материала. С помощью результатов этой модели также была построена кривая зависимости предела текучести от общей пластической деформации, которая показала хорошее качественное и количественное совпадение с экспериментальной кривой по сверхпластичности нанокристаллического алюминий-литиевого сплава (Al-5Mg-2Li (1420-Al)).

Вторая глава посвящена исследованию зарождения деформационных двойников на границах зерен и вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах. В п. 2.1 Предложена теоретическая модель, описывающая зарождение деформационных двойников на границах зерен в нанокристаллических материалах под действием внешнего приложенного напряжения и поля напряжений диполя стыковых или зернограничных клиновых дисклинаций. По мере увеличения толщины двойниковой пластины наблюдаются две стадии локального упрочнения и промежуточная стадия локального течения нанокристаллического металла в масштабе одного нанозерна. При этом уровень критического напряжения на всех этих стадиях оказывается тем выше, чем меньше мощность дисклинационного диполя. Рассмотрены равновесные толщина и форма двойниковой пластины. Показано, что они хорошо согласуются с известными из литературы результатами экспериментальных наблюдений. В п. 2.2 произведено теоретическое описание процесса зарождения деформационных двойников вблизи вершины микротрещины в нанокристаллических металлах и керамиках. Рассчитаны критические напряжения образования деформационных двойников различной толщины. Рассмотрены равновесные толщина и форма двойников. Обсуждена роль зарождения деформационного двойника вблизи вершины трещины, как механизма повышения трещиностойкости нанокристаллических материалов.

Третья глава посвящена теоретическому исследованию зернограничных мод наномасштабной пластической деформации и их взаимодействия в нанокристаллических пленках. В п. 3.1 разработана теоретическая модель механизма релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических

пленках в результате действия межзеренного скольжения. В этих моделях межзеренное скольжение, сопровождающееся миграцией тройных стыков границ зерен приводит к образованию ансамблей диполей дисклинаций, которые являются носителями ротационной деформации. Показано, что образование таких ансамблей дисклинационных дефектов способно существенно снижать напряжения несоответствия, возникающие в нанокристаллических пленках и покрытиях. В п. 3.2 предложена теоретическая модель, описывающая микромеханизм релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках за счет ускоренного диффузионного массопереноса по границам зерен. В рамках предлагаемой модели произведена оценка характерного времени релаксации напряжений несоответствия путем зернограничной диффузии в композитах типа «нанокристаллическая пленка/монокристаллическая подложка» для металлических систем Ni/Cu и Cu/Ag. В п. 3.3 представлено резюме к главе 3.

В **четвертой главе** рассмотрено влияние наномасштабной пластической деформации на зарождение и рост трещин в нанокристаллических твердых телах. В п. 4.1 и 4.2 разработаны теоретические модели, которые описывают зарождение новых наноскопических зерен вблизи вершин трещин и цепочек в нанокристаллических керамиках и металлах при механическом нагружении. В рамках модели наноскопические границы зерен под действием высоких сдвиговых напряжений вблизи вершин трещин расщепляются на неподвижные и подвижные границы зерен. Миграция подвижных границ зерен, содержащих диполи дисклинаций, приводит к зарождению наноскопических зерен вблизи вершин трещин. Такой процесс зарождения наноскопических зерен представляет собой особую моду ротационной пластической деформации и приводит к частичной релаксации высоких локальных напряжений вблизи вершин трещин. Последнее обуславливает увеличение трещиностойкости нанокристаллических керамик и металлов.

В **заключение** приведен перечень основных результатов и сформулированы основные выводы диссертации.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на международной конференции “Nanomaterials and Nanotechnologies” (Крит, Греция, 2003); международном симпозиуме MRS Symposium “Mechanical Properties of Nanostructured Materials and Nanocomposites” (Бостон, США, 2003), международном семинаре “Nanostructured Materials Mechanics” (Санкт-Петербург, Россия, 2004), 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-ом международной конференции “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург (Репино), Россия, 2010); 39-ом международной конференции “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург (Репино), Россия, 2011); 40-ом 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 (Rodoss, Greece, 2012); 41-ом международной конференции “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург, Россия, 2013); 5-ой международной конференции NANOCON 2013 (Brno, Czech Republic, 2013), 5-ой международной конференции ICNFA’14 (Prague, Czech Republic, 2014) и семинарах в Институте проблем машиноведения РАН.

Основные публикации по теме работы

Материалы диссертации опубликованы в 36-ти научных статьях [1а-36а] в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах, индексируемых в реферативных базах Web of Science и Scopus. Список публикаций приведен в п. Л.2.

Личный вклад соискателя заключается в решающем участии на всех стадиях разработки теоретических моделей. Все публикации по теме диссертации подготовлены либо лично автором, либо при его участии с наиболее существенным среди соавторов вкладом.

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, выпускаемых 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 влияние 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.

ГЛАВА 1

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОД ДЕФОРМАЦИИ И АККОМОДАЦИИ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОМ И СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

В этой главе будет рассмотрено взаимодействие межзеренного скольжения и ротационной деформации, а также взаимодействие межзеренного скольжения и решеточного скольжения при (сверх)пластическом деформировании нанокристаллических материалов (НКМ).

На данный момент устоялась точка зрения [37-45,56-61], 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. Тройные стыки границ зерен служат эффективными стопорами для скольжения зернограничных дислокаций, затрудняя межзеренное скольжение. Затруднение реализации межзеренного скольжения приводит к формированию разностных дислокаций и зернограничных дисклинаций в тройных стыках границ зерен, 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 вносят такие специфические механизмы деформации, как ротационная деформация и скольжение решеточных дислокаций, выпускаемых из границ зерен [62-70,99-101]. 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.

Целью этой главы является теоретическое исследование взаимосвязи межзеренного скольжения с ротационной деформацией (раздел 1.1) и разработка теоретических моделей взаимодействия межзеренного скольжения с решеточным скольжением вблизи тройных стыков границ зерен при пластической и сверхпластической деформации НКМ (разделы 1.2 и 1.3). При написании Главы 1 использовались материалы, опубликованные автором в соавторстве в работах [8а,10а,12а,24а,26а-30а,32а-36а].

1.1. Взаимодействие межзеренного скольжения и ротационной деформации при пластическом деформировании НКМ.

В этом разделе будет рассмотрено совместное действие межзеренного скольжения и ротационной деформации (вращения зерен) и переход от межзеренного скольжения, заторможенного вблизи тройного стыка границ зерен, к ротационной деформации.

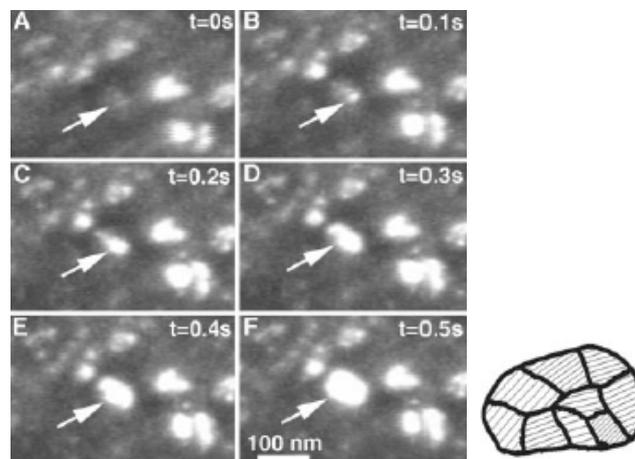


Рис. 1.1 Последовательность темнопольных микроснимков структуры нанокристаллического Ni со средним размером зерна 10 nm [69].

Экспериментальные данные указывают на связь межзеренного скольжения с ротационной деформацией. Так, в экспериментальных работах [51,52] авторы наблюдали *in situ* в нанокристаллических пленках поворот нанокристаллитов с размером $d < 25$ nm как целых, сопровождающийся межзеренным скольжением. В публикации Шена и др. [69] по наблюдению *in situ* (Рис. 1.1) вращения скопления зерен со средним размером $d \approx 10$ nm в нанокристаллическом никеле также указывается на связь ротационной деформации с межзеренным скольжением.

Целью настоящего раздела является теоретическое исследование взаимосвязи межзеренного скольжения с ротационной деформацией, осуществляемой за счет движения зернограничных дисклинаций, которые образуются при переползании зернограничных дислокаций вдоль границ зерен в нанокристаллических материалах. Рассматривается возможность, при определенных условиях деформирования, перехода от зернограничного скольжения к ротационной деформации (повороту зерен как целого). При написании этого раздела использовались результаты и данные, опубликованные в работах [26а, 32а-36а].

1.1.1 Совместное действие межзеренного скольжения и ротационной деформации

В нанокристаллических материалах вследствие малости размера зерна и высокой плотности границ зерен высока объемная доля тройных стыков границ зерен. Тройные стыки зерен границ зерен при этом выступают в качестве препятствий для скольжения зернограничных дислокаций. Для продолжения скольжения вдоль границ зерен, примыкающим к этим тройным стыкам, зернограничные дислокации могут расщепляться на пары новых скользящих зернограничных дислокаций. На самих тройных стыках при этом могут формироваться разностные дислокации. В работе Федорова и др. [59]

рассмотрены характеристики различных вариантов расщепления скользящих зернограницных дислокаций на тройном стыке границ зерен.

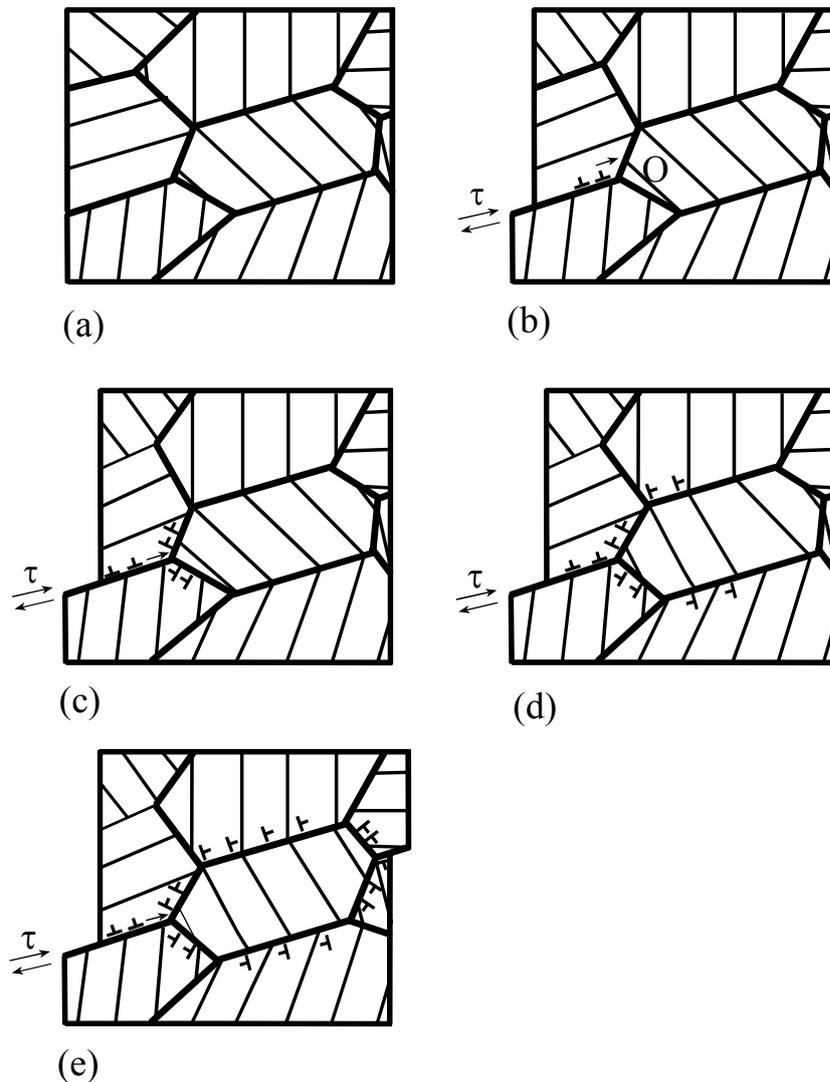


Рис. 1.2 Совместное развитие межзеренного скольжения и ротационной деформации. (а) Нанокристаллический образец в недеформированном виде. (б) Под действием внешнего сдвигового напряжения начинается скольжение зернограницных дислокаций. (с) Скользящие зернограницные дислокации поджимаются к тройному стыку границ зерен O и расщепляются на переползающие зернограницные дислокации. (д) Повторные расщепления скользящих дислокаций, переползание которых сопровождается поворотом кристаллической решетки. (е) Переползающие дислокации охватывают все зерно, приводя к его повороту как целого.

Однако существует еще одна возможность расщепления зернограницных дислокаций на тройном стыке границ зерен, которая пока не

рассматривалась. Заторможенные тройными стыками зернограницные дислокации (Рис. 1.2b) под действием внешнего сдвигового напряжения τ могут расщепляться с образованием не скользящих, а переползающих зернограницных дислокаций (Рис. 1.2c). Если процесс такого расщепления повторяется несколько раз на одном и том же тройном стыке, то на примыкающих к нему границах зерен образуются две стенки переползающих краевых дислокаций (Рис. 1.2d). Формирующиеся стенки зернограницных дислокаций вызывают переориентацию кристаллических решеток смежных зерен, то есть локальную пластическую деформацию. В конечном итоге этот процесс может охватить все зерно, которое при этом повернется на некоторый угол как целое (Рис. 1.2e).

Таким образом, заторможенное межзеренное скольжение может вызвать пластический поворот соседнего зерна. Естественно, такой механизм может быть эффективным только при условии интенсивной зернограницной диффузии вакансий, способных обеспечить требуемую скорость переползания зернограницных дислокаций.

Рассмотренную модель можно исследовать с двух сторон – с позиций термодинамики и кинетики. Термодинамический анализ позволяет найти энергетическую выгодность такого процесса и определяет необходимые условия его реализации. С позиций же кинетики находятся достаточные для этого условия. В настоящей главе задача решается в рамках первого подхода, что позволяет получить новые результаты о взаимосвязи межзеренного скольжения и ротационной деформации. Второй подход требует постановки и решения сложной задачи о зернограницной диффузии вакансий в системе с многими источниками и стоками, с учетом сильно неоднородного поля упругих напряжений дислокационно-дисклинационной структуры, эволюционирующей в пространстве и времени. Такая задача пока не ставилась и не решалась.

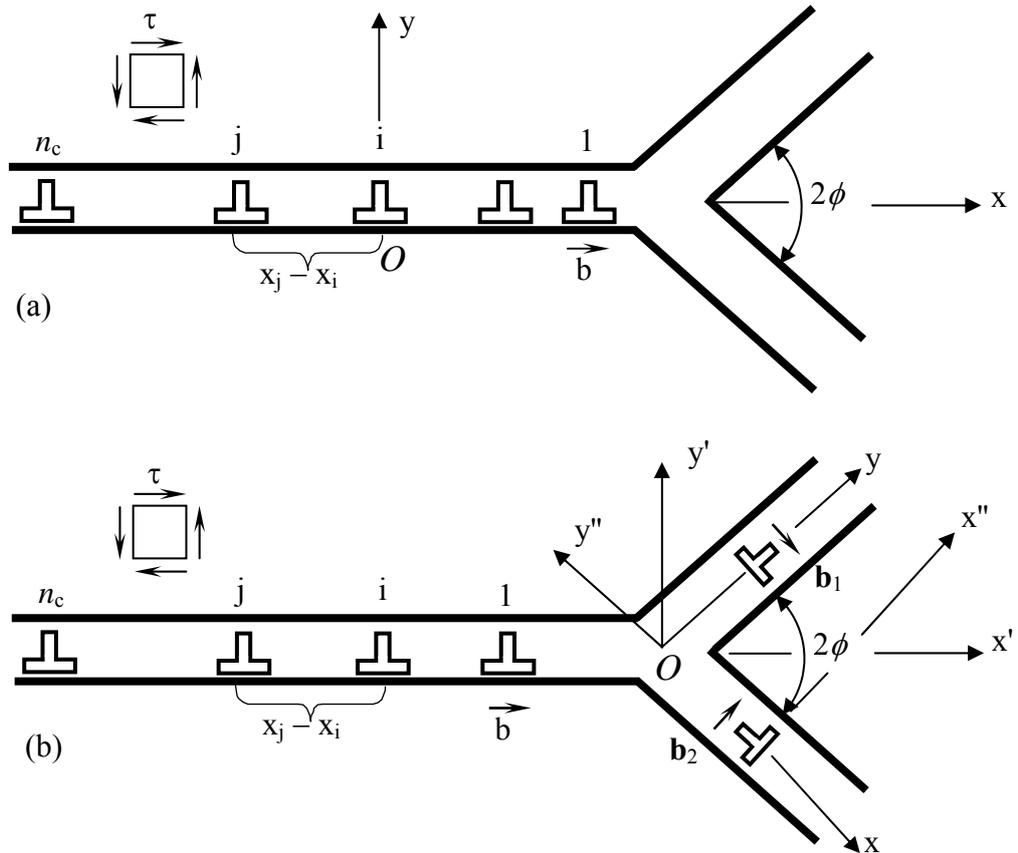


Рис. 1.3 Расщепление головной дислокации скопления скользящих зернограничных дислокаций, поджатых к тройному стыку границ зерен (а), на две зернограничные дислокации, переползающие по смежным границам (б). Показаны координатные системы, использованные в расчетах.

Рассмотрим скопление n_c зернограничных дислокаций с векторами Бюргера \vec{b} , поджатых внешним сдвиговым напряжением τ к тройному стыку границ зерен (Рис. 1.3а). Допустим, что головная дислокация этого скопления расщепляется на две новые зернограничные дислокации с векторами Бюргера \vec{b}_1 и \vec{b}_2 , способные переползать по примыкающим к тройному стыку границам (Рис. 1.3б). Такой процесс расщепления и последующего переползания дислокаций можно охарактеризовать изменением полной энергии системы $\Delta W = W_2 - W_1$, где W_1 и W_2 – энергии системы соответственно в исходном “нерасщепленном” (Рис. 1.3а) и конечном “расщепленном” (Рис. 1.3б) состояниях. Равенство $\Delta W = 0$

позволит нам определить соответствующие критические значения параметров системы.

Полная энергия W_1 исходной дефектной конфигурации (на единицу длины дислокаций) состоит из двух слагаемых:

$$W_1 = E_1^{pu} + E_{\Sigma_1}^{b-b}, \quad (1.1)$$

где E_1^{pu} – сумма полных собственных энергий n_c зернограничных дислокаций, составляющих исходное скопление, $E_{\Sigma_1}^{b-b}$ – суммарная энергия взаимодействия между всеми дислокациями в исходном скоплении.

Выражение для первого слагаемого легко записать сразу [91]:

$$E_1^{pu} = n_c \frac{Db^2}{2} \left(\ln \frac{R}{b} + 1 \right), \quad (1.2)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, R – радиус экранировки дальнедействующих полей напряжений дислокации.

Чтобы найти второе слагаемое, нужно сначала определить энергию E_{ij}^{b-b} парного взаимодействия дислокаций в скоплении. Возьмем для этого две произвольные дислокации с номерами i и j (Рис. 1.3а), расстояние между которыми равно $x_i - x_j$. Положения этих дислокаций x_i и x_j можно определить [101], используя теорию полиномов Лагерра $L_n(x)$, которые определяются как решения дифференциального уравнения

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + (1-x) \frac{dy}{dx} + ny = 0. \quad (1.3)$$

Первая производная полинома Лагерра $L'_n(x)$ является решением уравнения

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (2-x) \frac{dy}{dx} + (n-1)y = 0 \quad (1.4)$$

и определяется неравенством:

$$L'_n(x) = -\sum_{k=0}^{n-1} \frac{n!(-x)^k}{k!(k+1)!(n-k-1)!}. \quad (1.5)$$

В работе [101] было показано, что корни первой производной полинома Лагерра $L'_n(x)$ как раз и определяют положения дислокаций в дискретном дислокационном скоплении. Численно определяя, таким образом, положения всех дислокаций в скоплении для заданных n_c и τ , можно рассчитать и энергии их парного взаимодействия как работы по зарождению одной дислокации в поле напряжений другой. Заметим, что такой подход использовался ранее в работе [59]. Таким образом, энергия E_{ij}^{b-b} может быть сосчитана с помощью формулы [92]:

$$E_{ij}^{b-b} = -b \int_{-R}^{-(x_j - x_i)} \tau_{xy}^i(x, y=0) dx, \quad (1.6)$$

где τ_{xy}^i – касательное напряжение, действующие со стороны i -ой \vec{b} -дислокации, вдоль плоскости скольжения j -ой \vec{b} -дислокации. Это сдвиговое напряжение может быть записано в системе координат Oxy (Рис. 1.3а) как следующее

$$\sigma_{xy}^i = Dbx \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (1.7)$$

Подставляя выражение (1.7) в формулу (1.6), после интегрирования получаем формулу для парного взаимодействия \vec{b} -дислокаций с номерами i и j :

$$E_{ij}^{b-b} = Db^2 \ln \frac{R}{x_j - x_i}. \quad (1.8)$$

Тогда суммарную энергию всех парных взаимодействий \vec{b} -дислокаций в скоплении можно записать в виде двойной суммы по индексам i и j :

$$E_{\Sigma 1}^{b-b} = \sum_{i=1}^{n_c-1} \sum_{j=i+1}^{n_c} E_{ij}^{b-b} = Db^2 \sum_{i=1}^{n_c-1} \sum_{j=i+1}^{n_c} \ln \frac{R}{x_j - x_i}. \quad (1.9)$$

Полную энергию конечной “расщепленной” дефектной конфигурации (Рис. 1.3b) представим как сумму из девяти слагаемых:

$$W_2 = E_2^{pu} + E_{\Sigma 2}^{b-b} + E_s^{b_1} + E_s^{b_2} + E_{\Sigma}^{b-b_1} + E_{\Sigma}^{b-b_2} + E^{b_1-b_2} + E^{\tau-b_1} + E^{\tau-b_2}, \quad (1.10)$$

где E_2^{pu} – сумма всех собственных энергий \vec{b} -дислокаций, оставшихся в скоплении после расщепления головной дислокации; $E_{\Sigma 2}^{b-b}$ – сумма всех энергий взаимодействия между этими \vec{b} -дислокациями; $E_s^{b_1}$ и $E_s^{b_2}$ – полные собственные энергии \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокаций, на которые расщепилась головная дислокация (то есть, переползающих дислокаций); $E_{\Sigma}^{b-b_1}$ и $E_{\Sigma}^{b-b_2}$ – энергии взаимодействия \vec{b} -дислокаций скопления с переползающими \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокациями, $E^{b_1-b_2}$ – энергия взаимодействия между переползающими \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокациями, $E^{\tau-b_1}$ и $E^{\tau-b_2}$ – эффективная работа по перемещению переползающих дислокаций в поле напряжения τ .

После расщепления головной дислокации число дислокаций в скоплении уменьшилось на единицу. Пока продукты расщепления – переползающие дислокации – не переместились далеко от тройного стыка, можно считать, что все дислокации скопления, кроме головной, остались приблизительно на своих местах. Тогда первое слагаемое E_2^{pu} в сумме (1.10) получается из выражения (1.2) для E_1^{pu} просто заменой n_c на $(n_c - 1)$. Второе слагаемое $E_{\Sigma 2}^{b-b}$ получается из выражения (1.9) для $E_{\Sigma 1}^{b-b}$ заменой в нижнем пределе первой суммы единицы на двойку. В результате для энергий E_2^{pu} и $E_{\Sigma 2}^{b-b}$ получаем выражения:

$$E_2^{pu} = (n_c - 1) \frac{Db^2}{2} \left(\ln \frac{R}{b} + 1 \right), \quad (1.11)$$

$$E_{\Sigma 2}^{b-b} = Db^2 \sum_{i=2}^{n_c-1} \sum_{j=i+1}^{n_c} \ln \frac{R}{x_j - x_i}. \quad (1.12)$$

Полные собственные энергии переползающих \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокаций даются известными формулами [91]:

$$E_s^{b_1} = \frac{Db_1^2}{2} \left(\ln \frac{R}{b_1} + 1 \right), \quad (1.13)$$

$$E_s^{b_2} = \frac{Db_2^2}{2} \left(\ln \frac{R}{b_2} + 1 \right). \quad (1.14)$$

Расчет энергии взаимодействия дислокаций скопления с переползающими дислокациями, строится следующим образом. Сначала находится энергия взаимодействия переползающей дислокации с произвольной дислокацией скопления. Например, энергия $E_i^{b-b_1}$ взаимодействия переползающей \vec{b}_1 -дислокации и i -ой \vec{b} -дислокации скопления, имеющей координату x_i . Эта энергия $E_i^{b-b_1}$ рассчитывается как работа по зарождению i -ой \vec{b} -дислокации скопления в поле напряжений \vec{b}_1 -дислокации [92]:

$$E_i^{b-b_1} = -b \int_{-R}^{-x_i} \tau_{x'y'}^{b_1}(x', y' = 0) dx, \quad (1.15)$$

где $\tau_{x'y'}^{b_1}$ – сдвиговое напряжение от переползающей \vec{b}_1 -дислокации, действующее в плоскости залегания скопления \vec{b} -дислокаций. Сдвиговое напряжение $\tau_{x'y'}^{b_1}$ может быть записано в системе координат $O'x'y'$, повернутой относительно системы координат Oxy на угол $\pi/2 - \phi$ (Рис. 1.3b), через известные [91] компоненты поля напряжений \vec{b}_1 -дислокации следующим образом:

$$\begin{aligned} \tau_{x'y'}^{b_1} = & \sigma_{xx}^{b_1} \alpha_1 \alpha_2 + \sigma_{yy}^{b_1} \beta_1 \beta_2 + \sigma_{zz}^{b_1} \gamma_1 \gamma_2 \\ & + \sigma_{xy}^{b_1} (\alpha_1 \beta_2 + \alpha_2 \beta_1) + \sigma_{yx}^{b_1} (\beta_1 \gamma_2 + \beta_2 \gamma_1) + \sigma_{zx}^{b_1} (\gamma_1 \alpha_2 + \gamma_2 \alpha_1), \end{aligned} \quad (1.16)$$

где $\alpha_1 = \cos(x', x)$, $\beta_1 = \cos(x', y)$, $\gamma_1 = \cos(x', z)$, $\alpha_2 = \cos(y', x)$, $\beta_2 = \cos(y', y)$ и $\gamma_2 = \cos(y', z)$.

После замены переменных $x = x' \sin \phi$ и $y = y' \cos \phi$ (записано с учетом $y' = 0$) для $\tau_{x'y'}^{b_1}$ получаем следующее окончательное выражение:

$$\tau_{x'y'}^{b_1} = Db_1 \frac{x'(x'^2 - 2x'p \cos \phi + p^2 \cos 2\phi) \sin \phi}{(x'^2 - 2x'p \cos \phi + p^2)^2}, \quad (1.17)$$

где p – расстояние, пройденное \vec{b}_1 -дислокацией.

Тогда энергия взаимодействия $E_i^{b-b_1}$ получается интегрированием выражения (1.17) с помощью формулы (1.15) в виде:

$$\begin{aligned} E_i^{b-b_1} = & Db b_1 \sin \phi \left(\frac{p^2 + Rp \cos \phi}{R^2 + 2Rp \cos \phi + p^2} - \frac{p^2 + x_i p \cos \phi}{x_i^2 + 2x_i p \cos \phi + p^2} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \ln \frac{R^2 + 2Rp \cos \phi + p^2}{x_i^2 + 2x_i p \cos \phi + p^2} \right). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Совершенно аналогично определяется и $E_i^{b-b_2}$ – энергия взаимодействия \vec{b}_2 -дислокации и i -ой \vec{b} -дислокации скопления (так как рассматривается симметричная ситуация расщепления зернограницной \vec{b} -дислокации (Рис. 1.3)):

$$\begin{aligned} E_i^{b-b_2} = & Db b_2 \sin \phi \left(\frac{p^2 + Rp \cos \phi}{R^2 + 2Rp \cos \phi + p^2} - \frac{p^2 + x_i p \cos \phi}{x_i^2 + 2x_i p \cos \phi + p^2} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \ln \frac{R^2 + 2Rp \cos \phi + p^2}{x_i^2 + 2x_i p \cos \phi + p^2} \right). \end{aligned} \quad (1.19)$$

Суммируя по i энергии $E_i^{b-b_1}$ и $E_i^{b-b_2}$, получаем энергию взаимодействия всех дислокаций скопления с переползающими \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокациями в следующем виде:

$$E_{\Sigma}^{b-b_1} + E_{\Sigma}^{b-b_2} = \sum_{i=1}^{n_c} (E_i^{b-b_1} + E_i^{b-b_2}). \quad (1.20)$$

Энергия взаимодействия между переползающими дислокациями $E^{b_1-b_2}$ также рассчитывается как работа по зарождению одной дислокации в поле напряжений другой. Опуская промежуточные результаты, выпишем окончательную формулу:

$$E^{b_1-b_2} = -\frac{Db_1b_2}{2} \left(\frac{2R^2 \sin^2 \phi}{R^2 - 2Rp \sin 2\phi + 4p^2 \sin^2 \phi} + \cos 2\phi \ln \frac{R^2 - 2Rp \sin 2\phi + 4p^2 \sin^2 \phi}{4p^2 \sin^2 \phi} \right). \quad (1.21)$$

Наконец, эффективная работа $E^{\tau-b_k}$ по перемещению переползающей \vec{b}_k -дислокации ($k=1,2$) в поле напряжения τ определяется простым равенством:

$$E^{\tau-b_k} = -b_k p \tau \sin 2\phi. \quad (1.22)$$

Таким образом, были определены все слагаемые выражений (1.1) для энергии W_1 и (1.10) для энергии W_2 , составляющих разность $\Delta W = W_2 - W_1$.

Рассмотрим уравнение $\Delta W = 0$ из которого можно легко найти критическое сдвиговое напряжение τ_{c1} , необходимое для расщепления головной дислокации скопления на две переползающие \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокации. Результаты численного расчета зависимости $\tau_{c1}(2\phi)$, который проводился для $b_1 = b_2 = b/(2\sin \phi)$, $n_c = 5$, $R = 10^5 b$ и $p = 10b$, показаны на Рис. 1.4.

Зависимость $\tau_{c1}(2\phi)$ показывает, что расщепление головной дислокации на переползающие дислокации – начальная стадия перехода от межзеренного скольжения к ротационной деформации – происходит при

меньших значениях τ_{c1} в области больших значений (80° - 120°) угла 2ϕ (Рис. 1.4).

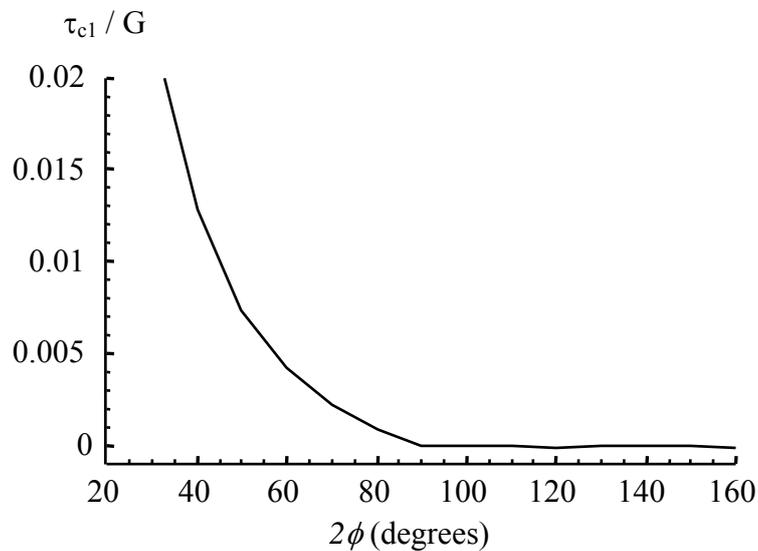


Рис. 1.4 Зависимость критического сдвигового напряжения τ_{c1} от угла 2ϕ раствора границ зерен тройного стыка.

Интересно, что в работе Федорова и др. [59], где рассматривалась передача межзеренного скольжения через тройной стык границ зерен, была показана энергетическая предпочтительность такого процесса в области малых значений угла 2ϕ . Получается, что если в ходе межзеренного 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 образуют острый угол, то вероятнее передача межзеренного скольжения через стык соседним границам (или одной из границ), если тупой, то вероятнее переход к ротационным механизмам деформации.

1.1.2 Переход от межзеренного скольжения к ротационной деформации

Рассмотрим, как система дефектов, описанная в предыдущем разделе, будет развиваться с течением времени под действием внешнего напряжения.

Впервые моменты времени после расщепления головной дислокации скопления на две переползающие дислокации общее распределение упругого поля и, соответственно, положение остальных дислокаций в скоплении практически не меняется (Рис. 1.3b).

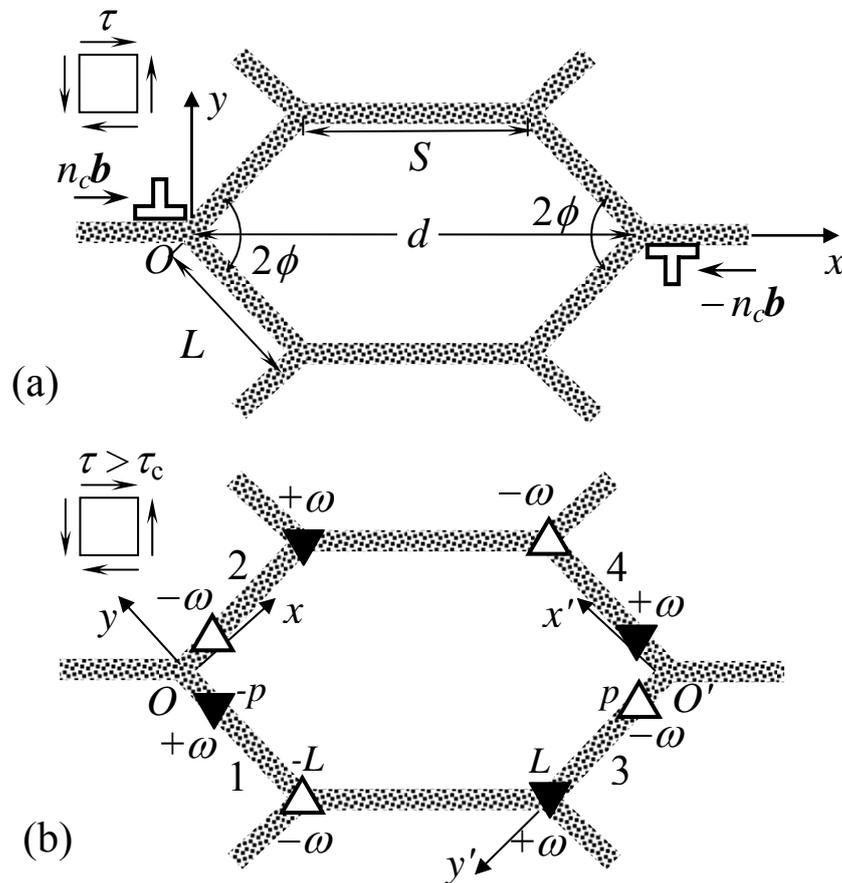


Рис. 1.5 Модель трансформации зернограничных дислокационных структур при переходе от зернограничного скольжения к ротационной деформации. (а) Две супердислокации, моделирующие скопления скользящих зернограничных дислокаций, поджатые напряжением τ к противоположным тройным стыкам границ зерен. (б) Четыре диполя частичных клиновых дисклинаций, моделирующих стенки переползающих дислокаций.

Однако по мере дальнейшего переползания \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокаций от тройного стыка их упругое воздействие на следующую дислокацию (раньше вторую, а теперь первую) скопления ослабевает, и эта дислокация оказывается поджатой к стыку. Здесь процесс расщепления может

повториться, и новая пара \vec{b}_1 - и \vec{b}_2 -дислокаций будет переползать по границам вслед за первой. Если такие реакции расщепления будут происходить с каждой новой головной дислокацией, то со временем на прилегающих к тройному стыку границах зерен образуются две стенки переползающих краевых дислокаций, которые по своим геометрическим и упругим характеристикам будут аналогичны двум двухосным диполям частичных клиновых дисклинаций.

Предположим теперь, что с противоположной стороны зерна (которое для простоты полагаем симметричным относительно центральной вертикальной оси) у тройного стыка формируется антисимметричная дефектная конфигурация. Сначала образуется скопление зернограницных дислокаций обратного знака (Рис. 1.5а; дислокационные скопления показаны как супердислокации с суммарными векторами Бюргера $\pm \vec{B} = \pm n_c \vec{b}$), которое затем трансформируется в два диполя клиновых частичных дисклинаций (Рис. 1.5b)

Здесь для простоты последующего анализа мы полагаем, что общее число $2n_c$ дислокаций, участвующих в таких трансформациях, не меняется, то есть отсутствует подпитка дислокационных скоплений из внешних источников. Это допущение, конечно, не является обязательным и при необходимости может быть опущено. Посмотрим, какие условия необходимы, чтобы произошла полная трансформация двух исходных скоплений зернограницных дислокаций (Рис. 1.5а) в стенки переползающих зернограницных дислокаций, моделируемые дисклинационными диполями (Рис. 1.5b).

Сравним полные энергии системы в начальном (\tilde{W}_1 , Рис. 1.5а) и конечном (\tilde{W}_2 , Рис. 1.5b) состояниях. Как и раньше, условие $\Delta \tilde{W} = \tilde{W}_2 - \tilde{W}_1 = 0$ позволяет определить критические значения параметров дефектной конфигурации.

Полную энергию системы (на единицу длины дислокаций) в начальном состоянии можно представить в виде суммы слагаемых:

$$\tilde{W}_1 = 2E_1^{pu} + 2E_{\Sigma 1}^{b-b} + E_{\text{int}}^{B-B}, \quad (1.23)$$

где первые два слагаемых нам уже известны – они описывают соответственно сумму собственных энергий дислокаций в скоплениях и сумму всех энергий междислокационного взаимодействия внутри скоплений, и определяются соответственно выражениями (1.2) и (1.9). Третье слагаемое E_{int}^{B-B} представляет собой энергию упругого взаимодействия между скоплениями, которую в первом приближении можно оценить как энергию взаимодействия двух супердислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{B}$ (рассчитывается аналогично 1.8):

$$E_{\text{int}}^{B-B} = -DB^2 \ln \frac{R}{d}, \quad (1.24)$$

где d – расстояние между тройными стыками (размер зерна) (Рис. 1.5а).

Полная энергия системы в конечном состоянии состоит из шести слагаемых:

$$\tilde{W}_2 = 4E_s^\Delta + 4E_\tau^\Delta + 2E_\tau^{pu} + 2E_{\text{int}}^{1-2} + 2E_{\text{int}}^{1-3} + 2E_{\text{int}}^{1-4}, \quad (1.25)$$

где E_s^Δ – полная собственная энергия дисклинационного диполя, E_τ^Δ – работа по его формированию из переползающих дислокаций в поле внешнего напряжения τ , E_τ^{pu} – работа по перемещению всех дислокаций скопления от их исходных позиций до соответствующего тройного стыка в поле τ , E_{int}^{i-j} – энергии упругого взаимодействия между дисклинационными диполями с номерами i и j ($i \neq j$; $i = 1, 2, 3$; $j = 2, 3, 4$).

Полная собственная энергия E_s^Δ дисклинационного диполя с длиной плеча $L - p$ и мощностью ω определяется известным выражением [102]:

$$E_s^\Delta = \frac{D\omega^2(L-p)^2}{2} \left(\ln \frac{R}{L-p} + \frac{1}{2} \right). \quad (1.26)$$

В рамках модели предполагается, что все четыре дисклинационных диполя, моделирующие стенки переползающих дислокаций (Рис. 1.5b), обладают одинаковой мощностью $\pm \omega$ и одинаковым плечом $L - p$, где $p = L - (1/\omega)(n_c - 1)b_1$. Таким образом, каждый дисклинационный диполь характеризуется одной и той же энергией (1.26).

Энергия E_{int}^{i-j} упругого взаимодействия между i -ым и j -ым дисклинационными диполями рассчитывается как работа по зарождению одного из диполей в упругом поле напряжений другого. Например, рассчитаем энергию E_{int}^{1-3} взаимодействия между первым и третьим дисклинационными диполями. В этом случае, в поле напряжений первого дисклинационного диполя зарождается третий диполь. Запишем компоненту τ_{xy}^1 поля напряжений первого дисклинационного диполя в системе координат $O'x'y'$ (с которой связан третий дисклинационный диполь) как следующую [90]:

$$\tau_{x'y'}^1 = D\omega \frac{(x' - x_{01})(y' - y_{01})}{(x' - x_{01})^2 + (y' - y_{01})^2} - \frac{(x' - x_{02})(y' - y_{02})}{(x' - x_{02})^2 + (y' - y_{02})^2}, \quad (1.27)$$

где $x_{01} = S \cos \phi$, $y_{01} = L + S \sin \phi$, $x_{02} = T - p \sin 2\phi$, $y_{02} = T' - p \cos 2\phi$ и $T = d \sin \phi$, $T' = d \cos \phi$.

Сначала рассчитаем работу E_{int}^{1-3} по зарождению отдельной \vec{b}_1 -дислокации, которая является структурным элементом третьего дисклинационного диполя, в поле напряжений первого диполя с помощью следующего интегрального выражения [92]:

$$E_{\text{int}}^{1-3} = -b_1 \int_{-R}^0 \tau_{x'y'}^1(x', y') dx'. \quad (1.28)$$

Тогда энергия взаимодействия E_{int}^{1-3} получается в результате интегрирования формулы (1.28) по длине третьего дисклинационного диполя с весовой функцией $1/l$:

$$E_{\text{int}}^{1-3} = \frac{1}{l} \int_p^L E'_{\text{int}}{}^{1-3}(y') dy', \quad (1.29)$$

где $l \approx b_1 / \omega$ [90] – расстояние между переползающими дислокациями в стенке, моделируемой дисклинационным диполем.

В результате после подстановки выражения (1.27) в (1.28) и вычисления интегралов (1.28) и (1.29) получаем окончательное выражение для E_{int}^{1-3} в виде:

$$E_{\text{int}}^{1-3} = E_{\text{int}}^{2-4} = \frac{D\omega^2}{4} \left\{ \Psi_+(R, L, T, T', y', \phi) - \Psi_+(R, p, T, T', y', \phi) - \Psi_+(0, L, T, T', y', \phi) + \Psi_+(0, p, T, T', y', \phi) \right\} \Big|_p^L, \quad (1.30)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm}(s, l, t, t', y', \phi) = & \{(x' + t)^2 + l^2 + (y' - t')^2 \\ & \pm 2l(y' - t') \cos 2\phi \mp 2l(x' + t) \sin 2\phi\} \\ & \times \ln[(x' + t)^2 + l^2 + (y' - t')^2 \\ & \pm 2l(y' - t') \cos 2\phi \mp 2l(x' + t) \sin 2\phi]. \end{aligned}$$

Из симметрии рассматриваемой дефектной конфигурации (Рис. 1.5b) следует, что энергия взаимодействия E_{int}^{1-3} между первым и третьим дисклинационными диполями такая же, как энергия взаимодействия E_{int}^{2-4} между вторым и четвертым дисклинационными диполями. Энергии взаимодействия E_{int}^{1-2} и E_{int}^{3-4} , и E_{int}^{1-4} и E_{int}^{2-3} , которые также по парно равны, получаются путем аналогичных (1.27)-(1.30) вычислений:

$$E_{\text{int}}^{1-2} = E_{\text{int}}^{3-4} = \frac{D\omega^2}{4} \left\{ \Psi_-(R, L, 0, 0, y', \phi) - \Psi_-(R, p, 0, 0, y', \phi) - \Psi_-(0, L, 0, 0, y', \phi) + \Psi_-(0, p, 0, 0, y', \phi) \right\} \Big|_p^L, \quad (1.31)$$

$$E_{\text{int}}^{1-4} = E_{\text{int}}^{2-3} = \frac{D\omega^2}{4} \left\{ \Psi_+(R, L, T, T', y', 0) - \Psi_+(R, p, T, T', y', 0) - \Psi_+(0, L, T, T', y', 0) + \Psi_+(0, p, T, T', y', 0) \right\} \Big|_p^L. \quad (1.32)$$

Работа по формированию E_τ^Δ стенки переползающих дислокаций (дисклинационного диполя) в поле внешнего напряжения τ выражается формулой:

$$E_\tau^\Delta = -\tau b_1 \sin 2\phi \left(p + \frac{b_1}{\omega} \sum_{i=1}^{n_c} (i-1) \right) = -\tau b_1 \sin 2\phi \left(p + \frac{b_1 n_c (n_c - 1)}{2\omega} \right). \quad (1.33)$$

Работа E_τ^Δ одинакова для всех дисклинационных диполей (Рис. 1.5b).

Работа E_τ^{pu} внешнего напряжения τ по перемещению дислокаций скопления к тройному стыку записывается следующим образом:

$$E_\tau^{pu} = -\tau b \sum_{i=1}^{n_c} |x_i|. \quad (1.34)$$

Таким образом, определены все слагаемые выражений (1.23) для энергии \tilde{W}_1 и (1.25) для энергии \tilde{W}_2 , что позволяет составить разность энергий $\Delta\tilde{W} = \tilde{W}_2 - \tilde{W}_1$.

Уравнение $\Delta\tilde{W} = \tilde{W}_2 - \tilde{W}_1 = 0$ позволяет легко определить критическое сдвиговое напряжение τ_c , при котором должен осуществиться переход от межзеренного скольжения к ротационной деформации. Это напряжение даются формулой:

$$\tau_c = \frac{\tilde{W}_2' - \tilde{W}_1(\tau_c)}{2b \sum_{i=1}^{n_c} |x_i(\tau_c)| + 4b_1 \sin 2\phi \left(p + \frac{b_1 n_c (n_c - 1)}{2\omega} \right)}, \quad (1.35)$$

где $\tilde{W}_2' = \tilde{W}_2 - 4E_\tau^\Delta - 2E_\tau^{pu}$.

Выразим расстояние L через S и d , которые соотносятся друг с другом как $q = S/d < 1$. В результате для L получаем следующие выражение:

$$L = \frac{d(1-q)}{2 \cos \phi}. \quad (1.36)$$

В рамках модели предполагается, что расстояние d (Рис. 1.5) приблизительно равно размеру (диаметру) зерна.

Рассмотрим зависимость критического напряжения τ_c от размера зерна d . Вычисление этих зависимостей проведем при следующих значениях параметров дефектной системы. Коэффициент Пуассона ν примем равным $\nu = 0.3$. Для величины векторов Бюргерса зернограничных дислокаций и мощности дисклинаций примем оценки: $b = 0.1 \text{ nm}$ и $\omega = 0.1 (\approx 5.7^\circ)$. Число дислокаций в скоплении будем изменять от 3 до 15 вместе с расстоянием L так, чтобы мощность дисклинаций ω оставалась постоянной. Расстояние p положим равным l . Заметим, что вид полученных в результате кривых $\tau_c(d)$ не очень чувствителен к выбору этих параметров, они просто должны быть разумными по порядку величины.

Построенные с использованием приведенных значений параметров зависимости $\tau_c(d)$ при различных значениях угла 2ϕ раствора тройного стыка границ зерен показаны на Рис. 1.6а для $q = 0.5$ и на Рис. 1.6б для $q = 0.1$. Следует отметить, что увеличение d приводит к росту как L , так и n_c , причем темпы этого роста зависят от угла 2ϕ . Для удобства на каждой кривой $\tau_c(d)$ (Рис. 1.6) нанесены точки, соответствующие $n_c = 3$ (треугольники), $n_c = 5$ (пятиугольники) и $n_c = 15$ (круги). В результате можно проследить зависимость τ_c от угла 2ϕ при постоянных значениях L и n_c .

Основной вывод, который можно сделать из анализа зависимостей $\tau_c(d)$, представленных на Рис. 1.6 – это уменьшение критического напряжения τ_c с уменьшением размера зерна d (измельчением зерна). Этот результат указывает на то, что зернам меньшего размера легче вращаться

(вращение происходит при меньшем значении критического напряжения τ_c)
чем большим зернам.

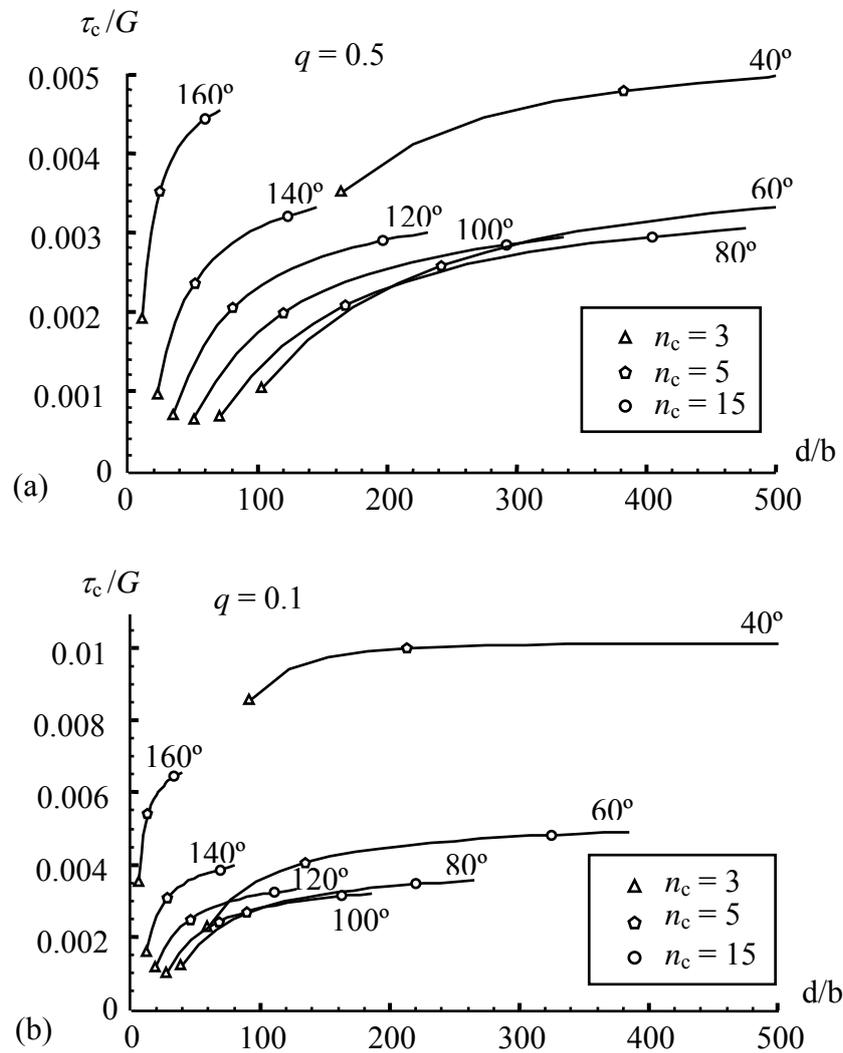


Рис. 1.6 Зависимости критического напряжения τ_c от размера зерна d .

Более того, критическое напряжение τ_c также сильно зависит от формы зерна, то есть от параметра q , характеризующего вытянутость зерна (чем меньше q , тем зерно более вытянутое), и угла 2ϕ раствора тройного стыка. Увеличение q приводит к уменьшению критического напряжения τ_c (Рис. 1.6), так как в этом случае (при фиксированных значениях d и 2ϕ) требуется меньшее число n_c зернограницных дислокаций для заполнения ими границы зерна (или, что тоже самое, меньшее значение плеча дисклинационного диполя $L - p$).

Зависимость критического напряжения τ_c от угла 2ϕ более сложная. В области относительно малых углов $2\phi < 100^\circ$ (при постоянных значениях L и n_c) критическое напряжение τ_c уменьшается с ростом угла 2ϕ и достигает минимума при $2\phi \approx 100^\circ$. В области же относительно больших углов $2\phi > 100^\circ$ наблюдается рост критического напряжения τ_c с увеличением угла 2ϕ .

Таким образом, из выше приведенных результатов следует, что зерна меньшего размера, характеризуемые большими значениями параметра q и углами $2\phi \approx 100^\circ$, способны вращаться при меньших значениях внешнего напряжения.

1.1.3 Резюме

В этом разделе было произведено теоретическое исследование взаимосвязи межзеренного скольжения и ротационной деформации в нанокристаллических материалах. Было показано, что в тех случаях, когда на смену скольжению решеточных дислокаций приходит скольжение зернограничных дислокаций, возможным способом перехода к ротационной деформации является формирование скоплений зернограничных дислокаций у тройных стыков границ зерен и их последующая трансформация в стенки переползающих зернограничных дислокаций (диполи зернограничных дисклинаций) (Рис. 1.2 и 1.5). Перемещение стенок переползающих зернограничных дислокаций вдоль границ зерен примыкающих к тройному стыку вызывает переориентацию кристаллической решетки и в итоге может приводить к вращению зерна как целого.

В п. 1.1.1 была рассмотрена теоретическая модель расщепления головной дислокации скопления скользящих зернограничных дислокаций на две переползающие зернограничные дислокации (Рис. 1.3). В отличие от ситуации, ранее рассмотренной Федоровым и др. [59], в которой

межзеренное скольжение беспрепятственно осуществлялось на тройных стыках с малыми углами раствора, расщепление на переползающие дислокации эффективно осуществляется на тройных стыках с большой величиной угла раствора.

В п. 1.1.2 была предложена теоретическая модель, описывающая переход от межзеренного скольжения и ротационной деформации. Также как и в п. 1.1.1, основным фактором перехода к ротационной деформации был геометрический фактор – величина угла раствора границ зерен в тройном стыке. При малых (острых) углах раствора межзеренное скольжение передавалось через тройной стык смежным границам. При больших (тупых) углах раствора происходил переход от межзеренного скольжения к ротационной деформации. На основе энергетических характеристик было рассчитано критическое напряжение этого перехода, величина которого сильно зависела от размера и геометрических характеристик зерна. Было установлено, что в первую очередь ротационная деформация начнет развиваться в зернах с наименьшими размерами, к которым примыкают тройные стыки с углом раствора $2\phi \approx 100^\circ$ и которые характеризуются большими значениями параметра q , описывающего вытянутость зерна.

Рассмотренные в этом разделе теоретические модели подтверждаются экспериментальными [51,52,62-70] наблюдениями вращения зерен в нанокристаллических металлах и сплавах.

1.2 Аккомодация межзеренного скольжения за счет испускания решеточных дислокаций из границ зерен в деформируемых нанокристаллических твердых телах

Механические характеристики НКМ (нанокристаллических материалов) во многом обусловлены наномасштабными эффектами и влиянием границ раздела, которые также задают эффективное действие специфических механизмов пластической деформации в НКМ. На данный момент специфическими механизмами, в частности, являются межзеренное скольжение, ротационная деформация и двойникование [62-70,71-77,100]. Эти механизмы пластической деформации эффективно реализуются при высоких значениях внешнего напряжения, которые могут вызвать зарождение нанотрещин, уменьшающих пластичность НКМ [103,104]. Например, согласно представлениям [105], межзеренное скольжение приводит к формированию зернограничных дисклинаций, поля упругих напряжений которых способны инициировать зарождение нанотрещин в деформируемых наноматериалах.

В научной литературе представлены теоретические модели, которые описывают зарождение нанотрещин в упругих полях зернограничных дислокаций [106] и дисклинаций [107], образующихся в тройных стыках границ зерен при межзеренном скольжении в НКМ. Модели [106,107], по существу, дают теоретическое описание конкуренции между процессами межзеренного скольжения и разрушения в НКМ, деформируемых преимущественно посредством межзеренного скольжения. 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 [99]). 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 настоящей работе предлагается теоретическая модель процесса испускания частичной дислокации из сегмента границы зерна с диполем дисклинаций (образовавшемся при межзеренном скольжении вблизи тройного стыка), а также проводится сравнение характеристик данного процесса с характеристиками зарождения нанотрещины в поле напряжений диполя дисклинаций в деформируемых НКМ. Результаты теоретической модели предлагаемой в данном разделе были опубликованы в работе [8a] и были получены с помощью непосредственного использования результатов из работ [10a,12a,24a,29a].

1.2.1 Модель испускания частичной дислокации из границы зерна

Рассмотрим двумерную модель нанокристаллического материала с упругими модулями G и ν , и средним размером зерна d (Рис. 1.7a). В соответствии с представлениями [105], 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. 1.7a,b). Такая квадрупольная конфигурация является самоэкранированной с радиусом экранировки полей напряжений s . Зернограничные дисклинации являются источниками высоких упругих напряжений. Существует несколько каналов

релаксации упругих напряжений, создаваемых зернограничными дисклинациями, а именно за счет зарождения нанотрещины (Рис. 1.7d), посредством локальной пластической деформации (Рис. 1.7c) и зарождения нанопор, модели зарождения которых даны в работах [10a,12a]. Работы [10a,12a] заложили методологическую базу для рассмотрения случая зарождения нанотрещины. В первом случае наноматериал, деформируемый посредством межзеренного скольжения, будет склонен к хрупкому поведению.

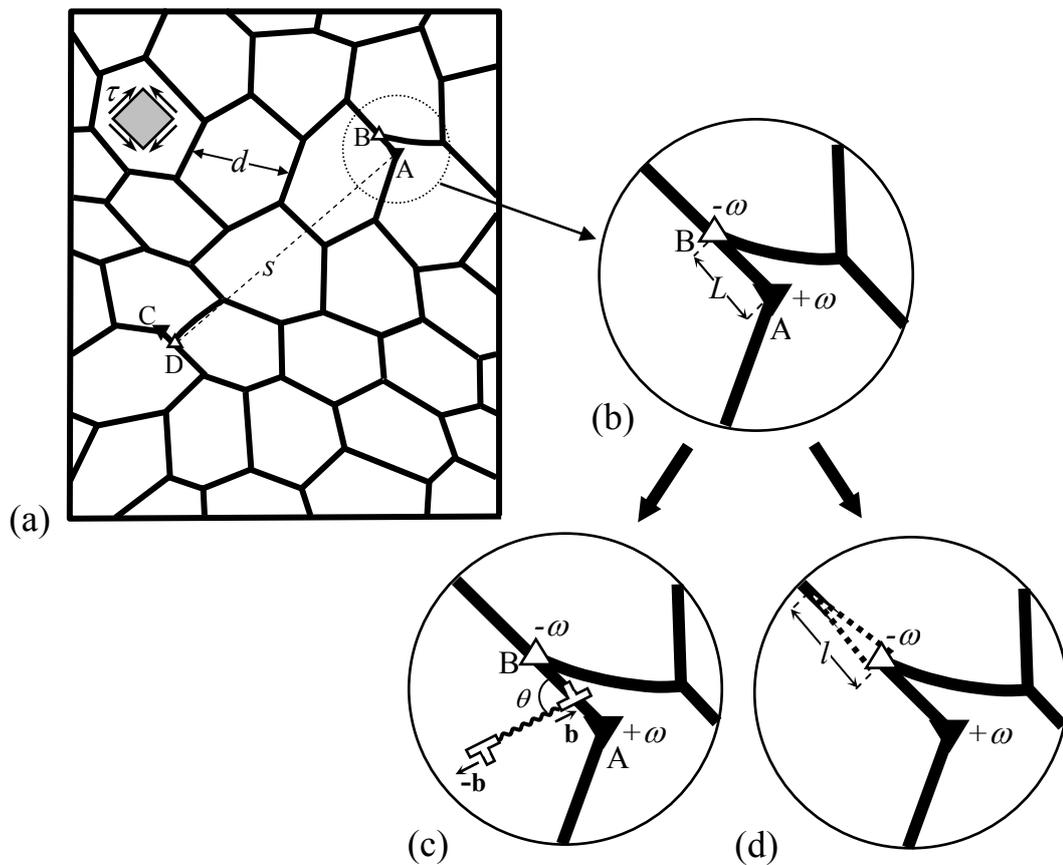


Рис. 1.7 Исходная 2-мерная модель нанокристаллического образца с квадруполем зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций $ABCD$, образовавшихся в результате межзеренного скольжения вдоль границ зерен AB и CD (a). Вставка с увеличенным фрагментом нанокристаллического материала, в котором находится диполь зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций AB (b). Испускание частичной $(-b)$ -дислокации из сегмента границы зерна, содержащей диполь зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций AB (c). Зарождение нанотрещины в поле напряжений диполя зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций (d).

В случае же релаксации упругих напряжений зернограничных дисклинаций путем пластической деформации, зернограничное скольжение не будет инициировать зарождение трещин, что значительно повысит пластические свойства наноматериала. Одним из таких каналов релаксации напряжений зернограничных дисклинаций является исследуемый в настоящей работе процесс испускания частичных дислокаций из сегментов границ зерен, содержащих зернограничные дисклинации.

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. 1.7с). Испускания частичной $(-b)$ -дислокации можно представить, как зарождение диполя дислокаций Шокли с векторами Бюргерса \mathbf{b} и $-\mathbf{b}$ (Рис. 1.7с). В настоящей работе будет исследовано испускание краевых 90° -дислокаций Шокли в нанокристаллических материалах с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой. Такие частичные дислокации характеризуются модулем вектора Бюргерса $b = a/\sqrt{6}$, где a - параметр решетки.

Рассматриваемый дислокационный диполь состоит из неподвижной b -дислокации (локализованной в границе AB) и подвижной $(-b)$ -дислокации, которая движется в теле зерна вдоль кристаллографической плоскости, ориентированной под углом θ относительно плоскости границы AB (Рис. 1.7с). Позади $(-b)$ -дислокации формируется дефект упаковки с удельной энергией γ_{st} и длиной p , которая равна расстоянию, пройденному $(-b)$ -дислокацией. Ниже мы рассмотрим энергетические характеристики данного процесса.

Испускание решеточной b -дислокации (Рис. 1.7с) характеризуется разностью энергий $\Delta W = W_2 - W_1$, где W_1 - энергия системы в начальном состоянии, содержащем только квадруполь зернограничных дисклинаций

(Рис. 1.7a,b), W_2 – энергия системы после испускания частичной ($-b$)-дислокацией в тело зерна (Рис. 1.7c). Процесс испускания b -дислокации энергетически выгоден при выполнении условия $\Delta W < 0$.

Разность энергий ΔW (на единицу длины дислокации) может быть записана в виде суммы следующих слагаемых:

$$\Delta W = E^b + E_{\text{int}1}^{\omega-b} + E_{\text{int}2}^{\omega-b} + E_\gamma - A, \quad (1.37)$$

где E^b – собственная энергия диполя $\pm b$ -дислокаций; $E_{\text{int}1}^{\omega-b}$ – энергия взаимодействия между диполем $\pm \omega$ -дисклинаций AB и диполем $\pm b$ -дислокаций; $E_{\text{int}2}^{\omega-b}$ – энергия взаимодействия между диполем $\pm \omega$ -дисклинаций CD и диполем $\pm b$ -дислокаций; A – работа внешнего сдвигового напряжения τ по перемещению частичной ($-b$)-дислокацией на расстояние p ; а E_γ – удельная энергия дефекта упаковки.

Полная собственная энергия диполя частичных $\pm b$ -дислокаций задается известным выражением [108]

$$E^b = Db^2 \left(\ln \frac{p - r_c}{r_c} + 1 \right), \quad (1.38)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, $r_c \approx b$ – радиус ядер $\pm b$ -дислокаций. Расчет энергий упругого взаимодействия диполей зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций AB и CD с диполем частичных $\pm b$ -дислокаций проводится стандартным образом, путем вычисления работы по зарождению дислокационного диполя в поле сдвиговых напряжений дисклинационного диполя (для примера см. [108]). Окончательные выражения для энергий $E_{\text{int}1}^{b-\omega}$ и $E_{\text{int}2}^{b-\omega}$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} E_{\text{int}1}^{\omega-b} &= \frac{Db\omega}{2} \left((h - l \sin \theta) \ln \left[1 + \frac{p^2 + 2lp \cos \theta}{l^2 + h^2 - 2lh \sin \theta} \right] - h \ln \frac{p^2 + h^2}{h^2} \right), \\ E_{\text{int}2}^{\omega-b} &= -\frac{Db\omega}{2} \left((h - l \sin \theta) \ln \left[1 + \frac{p^2 - 2sp + 2lp \cos \theta}{l^2 + s^2 + h^2 - 2l(h \sin \theta + s \cos \theta)} \right] \right. \\ &\quad \left. - h \ln \frac{(s - p)^2 + h^2}{s^2 + h^2} \right), \end{aligned} \quad (1.39)$$

где h – расстояние между тройным стыком A и точкой испускания частичной $(-b)$ -дислокации из границы AB (Рис. 1.7с).

Энергия дефекта упаковки E_γ дается очевидным выражением

$$E_\gamma = \gamma_{st} p. \quad (1.40)$$

Энергия A рассчитывается как работа, которая совершается внешним сдвиговым напряжением τ , при перемещении частичной $(-b)$ -дислокации на расстояние p :

$$A = -\tau b p \cos 2\theta. \quad (1.41)$$

Подставляя формулы (1.38)-(1.41) в формулу (1.37), находим следующее выражение для характеристической разности энергий ΔW :

$$\begin{aligned} \Delta W = \frac{Db\omega}{2} & \left\{ (h - l \sin \theta) \left(\ln \left[1 + \frac{p^2 + 2lp \cos \theta}{l^2 + h^2 - 2lh \sin \theta} \right] \right. \right. \\ & \left. \left. - \ln \left[1 + \frac{p^2 - 2sp + 2lp \cos \theta}{l^2 + s^2 + h^2 - 2l(h \sin \theta + s \cos \theta)} \right] \right) \right. \\ & \left. + h \ln \frac{h^2((s-p)^2 + h^2)}{(s^2 + h^2)(p^2 + h^2)} \right\} + Db^2 \left(\ln \frac{p - r_c}{r_c} + 1 \right) + \gamma_{st} p + \tau p b \cos 2\theta. \quad (1.42) \end{aligned}$$

Проведем анализ зависимости разности энергий ΔW от параметров системы. Расчет будем проводить на примере кубической фазы нанокристаллического карбида кремния SiC при повышенных температурах, при которых возможно решеточное скольжение. В расчетах будем использовать следующие значения параметров $G = 217$ GPa [109], $\nu = 0.23$ [109], $a = 0.436$ nm [110], $\gamma_{st} = 2$ mJ/m² [110] и $b \approx 0.178$ nm [110]. Значение сдвигового напряжения τ положим равным 2.5 GPa. Такое значение, как следует из оценок в работе [111], требуется для зарождения, рассматриваемых нами диполей зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций AB и CD . В качестве среднего размера зерна d выберем значение $d = 30$ nm. Расстояние s между дисклинационными диполями AB и CD , составляющими квадруполь, положим равным $s = 3d$, а плечи L этих диполей выберем равными $L = 1$ nm. Расстоянием h выберем равным $h = L/2$. На Рис. 1.8

представлены зависимости уровней разности энергии ΔW от расстояния p и угла θ . Из этих зависимостей видно, что в интервале углов $65^\circ < \theta < 95^\circ$ испускание дислокаций Шокли является энергетически выгодным и сопровождается постоянным понижением энергии с увеличением расстояния p , то есть по мере продвижения частичной ($-b$)-дислокации в теле зерна. Также, отдельные расчеты (которые здесь не приводятся) показали, что испускание полных решеточных дислокаций является энергетически невыгодным в рассматриваемом нами диапазоне параметров дефектной структуры.

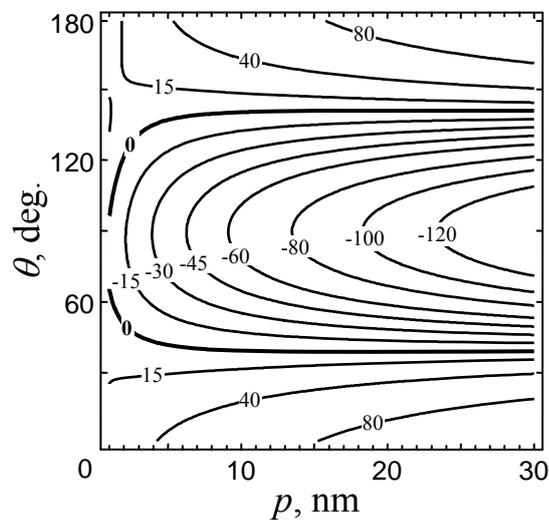


Рис. 1.8 Зависимости уровней разности энергии ΔW от расстояния p и угла θ на примере нанокристаллической керамики SiC при $\omega = 30^\circ$ и $L = 1$ nm.

1.2.2 Сравнение энергетической выгоды испускания частичной дислокации с зарождением нанотрещины

Рассмотрим процесс зарождения нанотрещины в поле напряжений диполя $\pm \omega$ -дисклинаций, образовавшихся в результате межзеренного скольжения (Рис. 1.7d). Предполагается, что нанотрещина длиной l зарождается на дисклинации с мощностью $-\omega$ вдоль границы зерна в области, где растягивающие напряжения, создаваемые дисклинационным диполем, являются максимальными (Рис. 1.7d). Условие энергетически

выгодного роста трещины задается следующим неравенством [111]:

$q(\tilde{l}) > q_c$. Здесь $\tilde{l} = l/L$,

$$q(\tilde{l}) = \tilde{l} \left[\left(\frac{2(\sqrt{1+\tilde{l}} - 1)}{\tilde{l}} - \ln \frac{\sqrt{1+\tilde{l}} + 1}{\sqrt{1+\tilde{l}} - 1} \right)^2 + \left(\frac{\tau}{D\omega} \right)^2 \right], \quad (1.43)$$

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

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 (1.43) 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 SiC, используя следующие характеристические значения ее параметров $\gamma = 1,5 \text{ J/m}^2$ [112], $\gamma_b = 0.5\gamma$.

На Рис. 1.9 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. (Более точно, первая область - это область над пунктирной линией, а вторая область расположена под пунктирной линией.)

Для системы с параметрами, значения которых находятся в области I, энергетически выгодно испускаться частичным дислокациям (заштрихованная область), а зарождение нанотрещины энергетически невыгодно (Рис. 1.9).

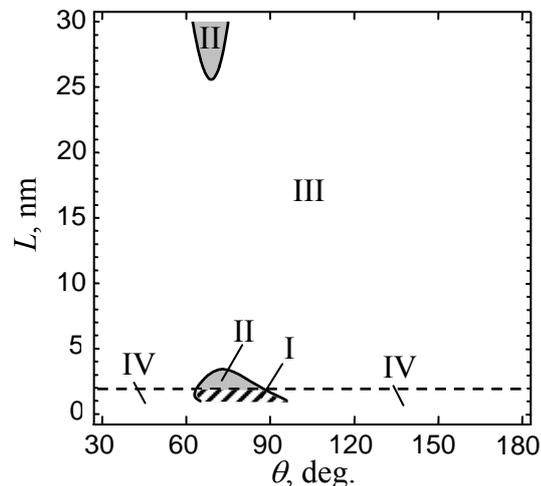


Рис. 1.9 Диаграмма, определяющая области параметров (L, θ) , в которых испускание частичных дислокаций и/или зарождение нанотрещины являются энергетически выгодными процессами.

Для системы с параметрами, значения которых находятся в области II возможно, как зарождение нанотрещины, так и испускание частичных дислокаций (области, закрашенные серым цветом) (Рис. 1.9). Область III, задает значения параметров (L, θ) , при которых энергетически выгодно зарождение только нанотрещины (Рис. 1.9). Наконец, в области IV, как зарождение нанотрещин, так и испускание частичных дислокаций являются энергетически невыгодными процессами (Рис. 1.9). Из зависимостей на Рис. 1.9 видно, что область I, где возможно только испускание частичных дислокаций, находится в интервале малых значений плеч $0 < L < 2 \text{ nm}$ дисклинационных диполей.

1.2.3 Рюземе

В настоящем разделе, на примере нанокристаллической керамики SiC, было показано, что испускание частичных дислокаций из границ зерен,

содержащих зернограницные дислокации, энергетически выгодно в определенном диапазоне параметров системы (в частности, при высоких температурах, при которых в керамиках реализуется решеточное скольжение). Также было проведено сравнение энергетических характеристик испускания дислокаций Шокли и процесса зарождения нанотрещин на зернограницных дисклинациях. В результате анализа конкуренции между исследуемыми процессами наномасштабной деформации и разрушения были определены области параметров системы, при которых испускание частичных дислокаций энергетически предпочтительнее зарождения нанотрещин. В частности, область I значений параметров системы, при которых энергетически выгодно только испускание частичных дислокаций, находится в интервале малых значений плеч $0 < L < 2 \text{ nm}$ дисклинационных диполей (Рис. 1.9). Таким образом, испускание дислокаций Шокли из границ зерен может служить эффективным микромеханизмом релаксации упругих напряжений, создаваемых зернограницными дисклинациями при межзеренном скольжении. При этом испускание дислокаций Шокли из границ зерен, препятствует зарождению трещин и, следовательно, повышает пластические свойства деформируемых нанокристаллических материалов.

1.3 Особенности межзеренного скольжения при сверхпластической деформации нанокристаллических твердых тел

Эффект сверхпластичности твердых тел уже давно и успешно используется в технологии традиционных металлов и сплавов [114-118]. Нанокристаллические же материалы отличаются высокой прочностью, которая в 2-10 раз больше, чем в крупнозернистых материалах того же химического состава [15,77], но при этом характеризуются крайне низкой пластичностью. Однако, на данный момент, обнаружен ряд нанокристаллических сплавов, проявляющих свойство сверхпластичности. В основном это сплавы на основе алюминия, титана и интерметаллидный сплав Ni_3Al . В результате в последние годы появилось множество экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованию сверхпластичности в мелкозернистых [45,119-125] и нанокристаллических материалах [37-45] (Рис. 1.10).

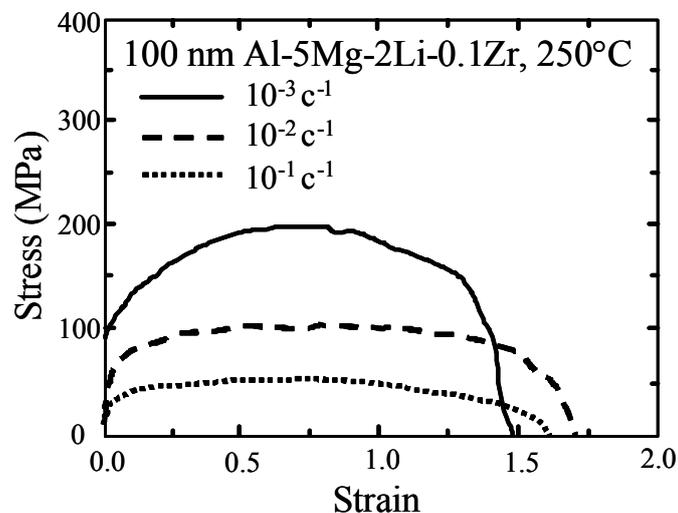


Рис. 1.10 Экспериментальные кривые сверхпластической деформации нанокристаллического сплава на основе алюминия (Al-5Mg-2Li) [37,42].

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. Особенно

значительные величины напряжения течения достигаются при деформировании нанокристаллических материалов (НКМ) со средним размером зерна порядка 50 nm [37,40,41-43]. При этом кривые деформирования имеют форму колокола с ярко выраженными длительными стадиями упрочнения и разупрочнения (Рис. 1.10).

В настоящее время считается общепринятым [4-6,7,76], что уникальные механические свойства НКМ связаны с высокой плотностью границ зерен и их тройных стыков. Это вызывает активизацию механизмов пластической деформации, связанных с перемещением и трансформациями зернограницных дефектов (дислокаций и дисклинаций), которые обычно слабо проявляются в крупнозернистых материалах. Высокая исходная концентрация таких зернограницных дефектов обусловлена сильно неравновесными условиями получения НКМ [7,77]. Такими механизмами пластичности в НКМ являются: ротационная деформация (вращение зерен) [51,52,62-70] и межзеренное скольжение [37-45,56-61]. Согласно экспериментальным наблюдениям [37-45], именно межзеренное скольжение, сопровождаемое механизмами аккомодации – миграцией границ зерен и приграничным решеточным скольжением, считается доминирующим механизмом сверхпластической деформации в НКМ. В этом случае необычные эффекты упрочнения НКМ на начальной стадии сверхпластической деформации и его последующего разупрочнения, а также очень высокие значения максимального напряжения течения могут быть связаны со специфическими особенностями межзеренного скольжения. Целью этой главы является разработка теоретической модели, дающей детальное описание особенностей сверхпластической деформации (эффектов упрочнения и разупрочнения, а также высокого напряжения течения) в НКМ. Результаты модели сравниваются с экспериментальными данными [37,42] по сверхпластичности нанокристаллического сплава на основе алюминия (Al-5Mg-2Li). При написании этой главы использовались материалы, опубликованные автором в соавторстве в работах [27a,28a,30a].

1.3.1 Трансформации зернограничных дислокаций на тройных стыках границ зерен

Для оценки величины напряжения течения и изучения его зависимости от деформации НКМ предлагается использовать следующую модель. Возьмем бесконечную двумерную упаковку гексагональных зерен одинаковой формы и размера (Рис. 1.11а). Выберем некоторую ломаную поверхность, образованную соединенными между собой границами зерен, стыки которых лежат на двух горизонтальных прямых – «верхней» и «нижней». Предполагается, что вдоль этих прямых действует максимальное сдвиговое напряжение τ , причем угол раствора между рассматриваемыми границами достаточно велик ($>120^\circ$). Предполагается также, что эти границы содержат подвижные зернограничные дислокации, способные скользить в плоскости «своей» границы, причем эти дислокации образуют дипольные конфигурации. При достаточно большом τ начинается их скольжение – вся дефектная структура приходит в движение и быстро переходит в новое квазиравновесное состояние, определяемое как уровнем τ , так и характеристиками самой этой структуры. Таким образом, осуществляется межзеренное скольжение вдоль выбранной ломаной поверхности. Рассмотрим процесс такого скольжения более детально.

Для простоты последующих расчетов возьмем бесконечную периодическую дефектную конфигурацию, образованную бесконечными рядами диполей зернограничных дислокаций, распределенных по границам зерен одинаковой длины l (Рис. 1.11а). Исходная конфигурация состоит из двух рядов диполей зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}_{1(1)}$ и $\pm \vec{b}_2$, параллельными плоскостям «своих» границ зерен. Для определенности предполагается, что эти дислокационные диполи имеют одинаковое плечо δ и их центральные точки совпадают с центрами границ зерен. Длина плеча δ показывает степень неоднородности границы зерна.

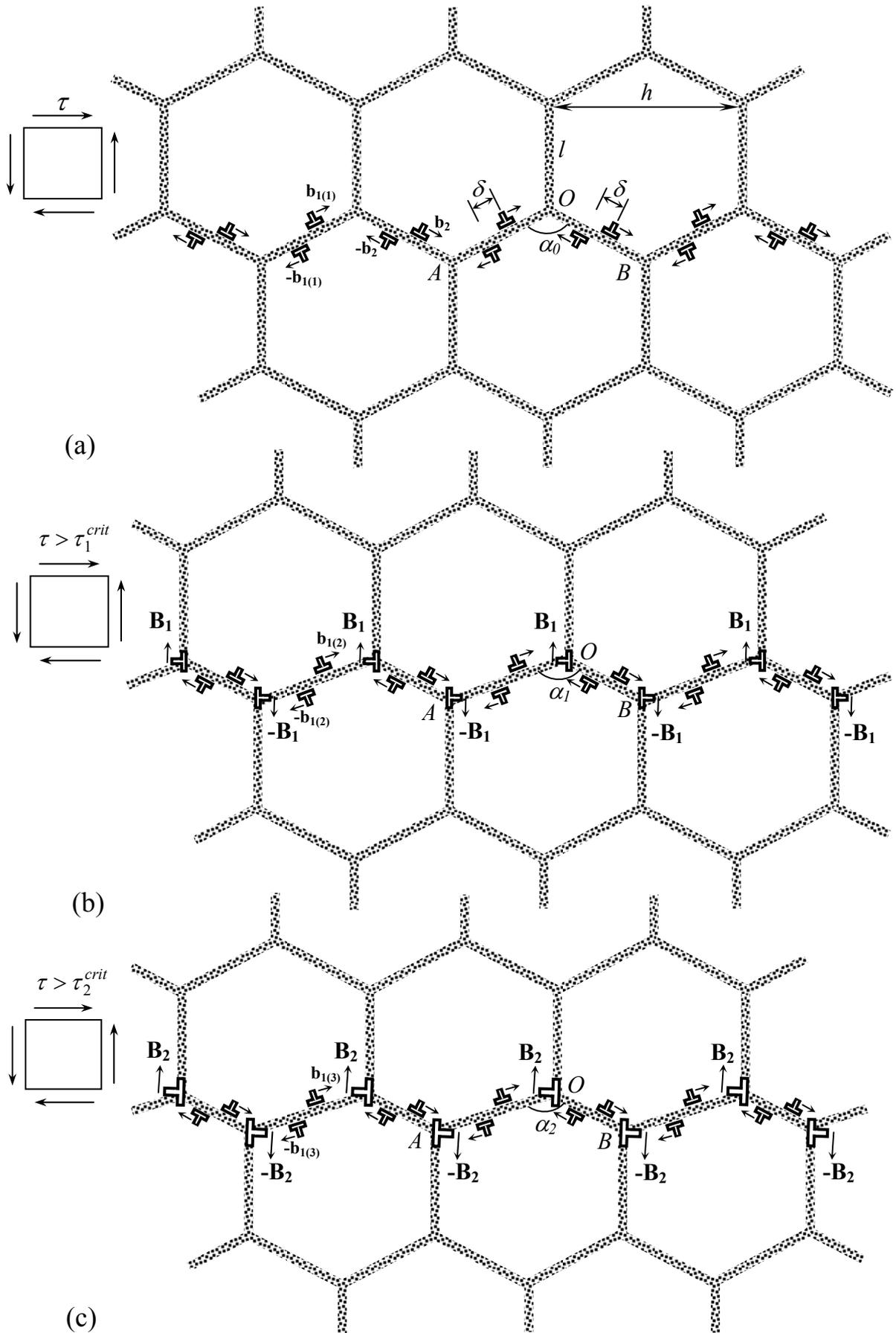


Рис. 1.11 Образование разностных дислокаций в тройных стыках зерен в результате скольжения зернограничных дислокаций (а) и увеличение их мощности (величины вектора Бюргерса) при каждом акте зернограничной деформации (b, c).

Период такой дефектной структуры равен расстоянию h между двумя соседними тройными стыками границ зерен. Для простоты расчетов в модели предполагается, что все дефектные структуры, образовавшиеся в результате трансформации исходной структуры, являются дипольными и периодическими с тем же периодом h . Таким образом, ансамбль таких дипольных периодических структур представляет собой самоэкранированную низкоэнергетическую дефектную конфигурацию.

Одинаковая периодичность всех дефектных структур позволяет выбрать один стык границ зерен для подробного рассмотрения эволюции дефектной системы. Пусть этим тройным стыком будет стык AOB (Рис. 1.11b). Геометрия тройного стыка границ зерен задается длиной l_i прилегающих к нему границ ($i = 1, 2$ – обозначение границы; в начальном состоянии длины границ равны: $l_i = l$) и углом раствора α_n между границами (в начальном состоянии – α_0), по которым осуществляется скольжение зернограницных дислокаций.

Если сдвиговое напряжение τ , достаточное для скольжения зернограницных дислокаций, меньше некоторого критического ($\tau < \tau_1^{crit}$), то зернограницные дислокации с векторами Бюргерса $\vec{b}_{1(1)}$ и $-\vec{b}_2$ останавливаются около «верхнего» тройного стыка границ зерен, пройдя среднее расстояние $(l - \delta)/2$. Для определенности положим, что элементарным актом зернограницного скольжения в масштабе зерна является «прохождение» зернограницной дислокации с вектором Бюргерса $-\vec{b}_2$ ($-\vec{b}_2$ -дислокации) через тройной стык. Это становится возможным при $\tau = \tau_1^{crit}$. Преодолев тройной стык, $-\vec{b}_2$ -дислокация вступает в реакцию с зернограницной дислокацией с вектором Бюргерса $\vec{b}_{1(1)}$ ($\vec{b}_{1(1)}$ -дислокацией), поджатой к этому тройному стыку с другой стороны. В результате реакции образуется разностная дислокация с вектором Бюргерса $\vec{B}_1 = \vec{b}_{1(1)} - \vec{b}_2$ (\vec{B}_1 -

дислокация), не способная скользить ни в одной из смежных межзеренных границ (Рис. 1.11b). Тройной стык, в свою очередь, с течением времени перемещается на малое расстояние b_2 под действием термодинамической силы натяжения межзеренных границ. В рамках этой модели рассмотренный процесс считается элементарным актом сверхпластической деформации в нанокристаллическом образце под действием внешней механической нагрузки.

После первого акта зернограничного скольжения (Рис. 1.11a,b) происходит зарождение двух новых рядов диполей зернограничных дислокаций с векторами Бюргера $\pm \vec{b}_{1(2)}$ и $\pm \vec{b}_2$. В частности, зарождения двух таких диполей зернограничных дислокаций происходит на границах AO и OB . Заметим, что в рамках принятой модели первый из этих векторов Бюргера меняется при каждом элементарном акте межзеренного скольжения, поскольку меняется ориентация границы AO , тогда как второй вектор Бюргера остается постоянным из-за постоянства ориентации границы OB . Под действием внешнего сдвигового напряжения τ зернограничные $\vec{b}_{1(2)}$ - и $-\vec{b}_2$ -дислокации скользят к тройному стыку AOB . Эти дислокации упруго взаимодействуют с разностной \vec{B}_1 -дислокацией, которая затрудняет их движение. Поэтому для осуществления нового элементарного акта межзеренного скольжения требуется повышение величины внешнего сдвигового напряжения τ до некоторого критического значения $\tau_2^{crit} > \tau_1^{crit}$. В результате этого акта формируется дислокация с вектором Бюргера $\vec{B}'_2 = \vec{b}_{1(2)} - \vec{b}_2$, которая вступает в реакцию с \vec{B}_1 -дислокацией. Эта реакция приводит к образованию новой разностной дислокации с вектором Бюргера $\vec{B}_2 = \vec{B}_1 + \vec{B}'_2$ (Рис. 1.11c).

Такая последовательная трансформация зернограничной структуры повторяется многократно. На каждом шаге происходит увеличение векторов Бюргера разностных дислокаций, которые находятся в тройных стыках

границ зерен. Рост векторов Бюргера разностных дислокаций приводит к увеличению критического сдвигового напряжения. Предполагается, что именно этот механизм вызывает сильное упрочнение, которое экспериментально наблюдается в НКМ при сверхпластической деформации [37-45].

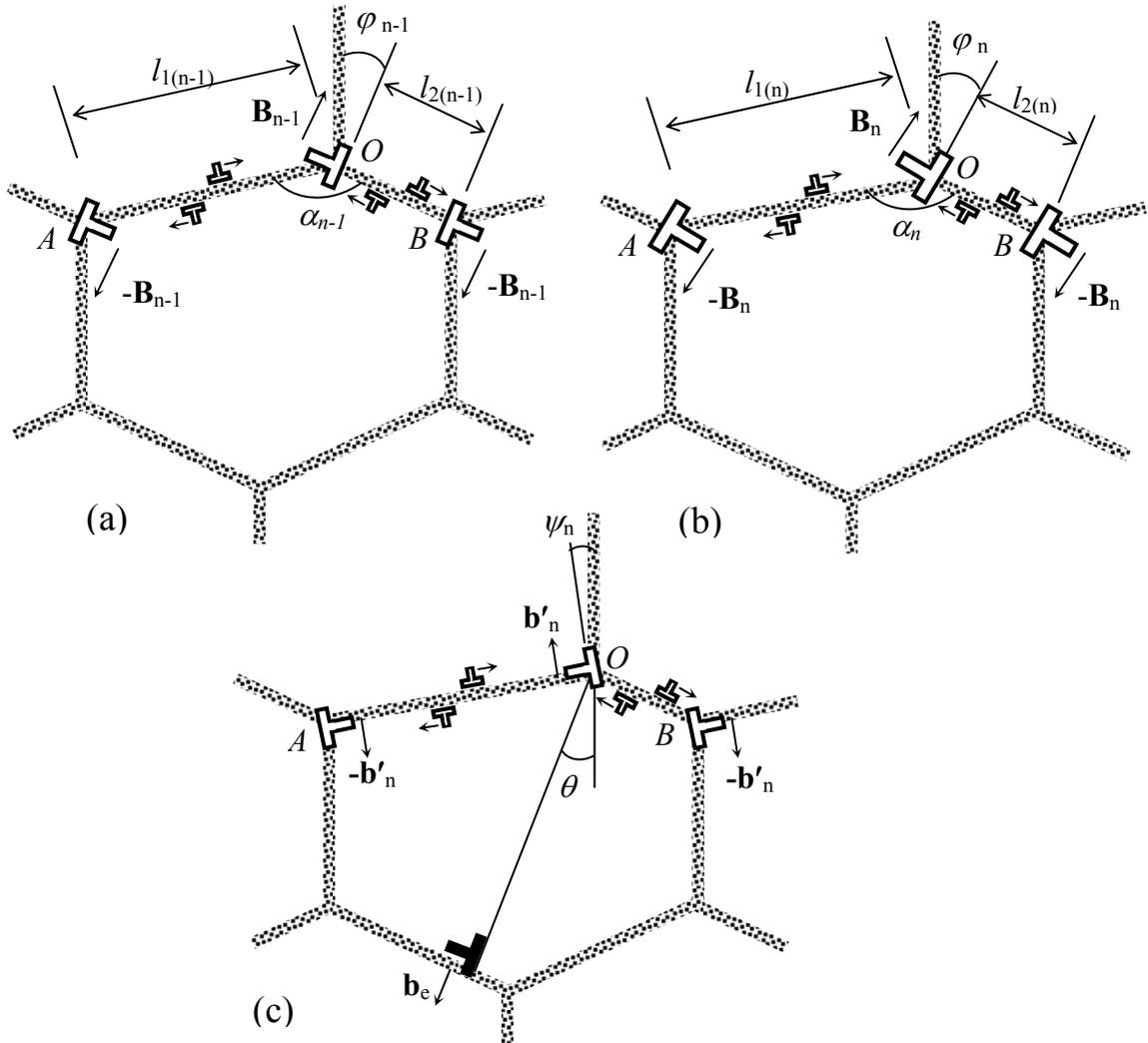


Рис. 1.12 Увеличение мощности разностных дислокаций (а, б) и испускание решеточной дислокации тройным стыком границ зерен (с).

Исследуем переход дефектной системы из $(n-1)$ -ого состояния с полной энергией W_{n-1} в n -ое состояние с полной энергией W_n (Рис. 1.12а,б). Такая трансформация дефектной системы энергетически выгодна при выполнении условия $\Delta W_n = W_n - W_{n-1} < 0$. Выражение $\Delta W_n = 0$ позволяет найти набор критических параметров перехода дефектной системы из $(n-1)$ -

ого состояния в n -ое. Все энергии берутся здесь в расчете на один период h дефектной структуры.

Рассмотрим сначала геометрические характеристики периодической структуры тройных стыков границ зерен. Поскольку все тройные стыки предполагаются одинаковыми, достаточно ограничиться рассмотрением одного из них, например стыка AOB (Рис. 1.12). В начальном (недеформированном) состоянии угол раствора стыка AOB равен α_0 , а все границы, прилегающие к нему, имеют одинаковую длину l (Рис. 1.11a). В этом случае период h , который является одинаковым для всех дефектных структур, дается следующим выражением:

$$h = 2l \sin \frac{\alpha_0}{2}. \quad (1.44)$$

Геометрию тройного стыка AOB в n -ом состоянии дефектной системы можно описать через исходные значения длины границ и угла между ними (l и α_0) и величину смещения nb_2 тройного стыка следующим образом:

$$l_{2(n)} = l - 2nb_2, \quad (1.45)$$

$$l_{1(n)} = \sqrt{l_{2(n)}^2 \cos^2 \frac{\alpha_0}{2} + \left(h - l_{2(n)} \sin \frac{\alpha_0}{2} \right)^2}, \quad (1.46)$$

$$\alpha_n = \arccos \left(\frac{l_{1(n)}^2 + l_{2(n)}^2 - h^2}{2l_{1(n)}l_{2(n)}} \right), \quad (1.47)$$

где $l_{1(n)}$ – длина границы AO , $l_{2(n)}$ – длина границы OB и α_n – угол раствора стыка AOB в n -ом состоянии. В формуле (1.45) берется удвоенное значение смещения тройного стыка $2nb_2$, так как по границе OB происходит одновременный сдвиг двух тройных стыков – O и B .

Величина вектора Бюргерса B_n и угол φ_n , которые характеризуют разностную дислокацию в n -ом состоянии (Рис. 1.12b), выражаются через

характеристики (B_{n-1} и φ_{n-1}) этой дислокации в $(n-1)$ -ом состоянии (Рис. 1.12а):

$$B_n = \sqrt{B_{n-1}^2 + \tilde{B}_n^2 + 2B_{n-1}\tilde{B}_n \cos\left(\frac{\alpha_n - \alpha_0}{2} - \varphi_{n-1}\right)}, \quad (1.48)$$

$$\varphi_n = \frac{\alpha_n - \alpha_0}{2} - \arcsin\left\{\frac{B_{n-1}}{B_n} \sin\left(\frac{\alpha_n - \alpha_0}{2} - \varphi_{n-1}\right)\right\}, \quad (1.49)$$

где $\tilde{B}_n = 2b_2 \cos(\alpha_n / 2)$.

Перейдем теперь к расчету энергетических характеристик. Энергия дефектной системы в $(n-1)$ -ом состоянии (Рис. 1.12а) состоит из следующих слагаемых:

$$\begin{aligned} W_{n-1} = & E_{self}^{B_{n-1}} + E_{self}^{b_{1(n-1)}} + E_{self}^{b_2} + E_c^{B_{n-1}} + E_c^{b_{1(n-1)}} + E_c^{b_2} \\ & + E_{int}^{B_{n-1}-b_{1(n-1)}} + E_{int}^{B_{n-1}-b_2} + E_{int}^{b_{1(n-1)}-b_2}, \end{aligned} \quad (1.50)$$

где $E_{self}^{B_{n-1}}$, $E_{self}^{b_{1(n-1)}}$ и $E_{self}^{b_2}$ – соответственно собственные упругие энергии бесконечного ряда диполей разностных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{B}_{n-1}$ и двух бесконечных рядов диполей скользящих зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}_{1(n-1)}$ и $\pm \vec{b}_2$; $E_c^{B_{n-1}}$, $E_c^{b_{1(n-1)}}$ и $E_c^{b_2}$ – энергии дислокационных ядер разностных и скользящих дислокаций; $E_{int}^{B_{n-1}-b_{1(n-1)}}$ и $E_{int}^{B_{n-1}-b_2}$ – соответственно энергии упругого взаимодействия между рядом диполей разностных $\pm \vec{B}_{n-1}$ -дислокаций и двумя рядами диполей скользящих $\pm \vec{b}_{1(n-1)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций; $E_{int}^{b_{1(n-1)}-b_2}$ – энергия упругого взаимодействия между рядами диполей скользящих $\pm \vec{b}_{1(n-1)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций.

На один период h приходятся две разностные и четыре скользящие дислокации. Вклад от их ядер может быть записан следующим образом [91]:

$$E_c^{B_{n-1}} = DB_{n-1}^2, \quad (1.51)$$

$$E_c^{b_{1(n-1)}} = Db_{1(n-1)}^2, \quad (1.52)$$

$$E_c^{b_2} = Db_2^2, \quad (1.53)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона.

Собственная упругая энергия $E_{self}^{B_{n-1}}$ ряда диполей разностных дислокаций в расчете на один период h вычисляется как работа по зарождению диполя разностных дислокаций в суммарном поле напряжений бесконечного ряда таких диполей, что дает

$$E_{self}^{B_{n-1}} = \frac{DB_{n-1}^2}{2} \times \left\{ \begin{aligned} &\cos^2 \varphi_{n-1} [\Psi_1(y_0 - r_c) - \Psi_1(r_c) + \Phi_-(x_0 - r_c, 0) - \Phi_-(r_c, 0) \\ &\quad + \Phi_+(x_0 - r_c, y_0) - \Phi_+(r_c, y_0) + \Phi_+(x_0, y_0 - r_c) - \Phi_+(x_0, r_c)] \\ &+ \sin^2 \varphi_{n-1} [\Psi_1(y_0 - r_{c_0}) - \Psi_1(r_{c_0}) + \Phi_+(x_0 - r_{c_0}, 0) - \Phi_+(r_{c_0}, 0) \\ &\quad + \Phi_-(x_0 - r_{c_0}, y_0) - \Phi_-(r_{c_0}, y_0) + \Phi_-(x_0, y_0 - r_{c_0}) - \Phi_-(x_0, r_{c_0})] \end{aligned} \right\}, \quad (1.54)$$

где

$$\Psi_1(t) = \ln \sin \frac{\pi t}{h},$$

$$\Phi_{\pm}(t_1, t_2) = \ln \left[\cos \frac{2\pi t_2}{h} - \cosh \frac{2\pi t_1}{h} \right] \pm \frac{\pi t_1}{h} \frac{\sinh \frac{2\pi t_1}{h}}{\cos \frac{2\pi t_2}{h} - \cosh \frac{2\pi t_1}{h}},$$

$$r_c \approx B_{n-1} \cos \varphi_{n-1}, \quad r_{c_0} \approx B_{n-1} \sin \varphi_{n-1}, \quad x_0 = l_{2(n-1)} \cos \frac{\alpha_0}{2} \quad \text{и} \quad y_0 = l_{2(n-1)} \sin \frac{\alpha_0}{2}.$$

Собственные энергии $E_{self}^{b_{1(n-1)}}$ и $E_{self}^{b_2}$ определяются аналогичными

выражениями:

$$\begin{aligned}
E_{self}^{b_{1(n-1)}} &= \frac{Db_{1(n-1)}^2}{2} \\
&\times \left\{ \cos^2(\alpha_{n-1} - \alpha_0 / 2) [\Psi_1(R_2 - r_{c_1}) - \Psi_1(r_{c_1}) + \Phi_-(R_1 - r_{c_1}, 0) - \Phi_-(r_{c_1}, 0) \right. \\
&\quad + \Phi_+(R_1 - r_{c_1}, R_2) - \Phi_+(r_{c_1}, R_2) + \Phi_+(R_1, R_2 - r_{c_1}) - \Phi_+(R_1, r_{c_1})] \\
&\quad + \sin^2(\alpha_{n-1} - \alpha_0 / 2) [\Psi_1(R_2 - r_{c_2}) - \Psi_1(r_{c_2}) + \Phi_+(R_1 - r_{c_2}, 0) - \Phi_+(r_{c_2}, 0) \\
&\quad \left. + \Phi_-(R_1 - r_{c_2}, R_2) - \Phi_-(r_{c_2}, R_2) + \Phi_-(R_1, R_2 - r_{c_2}) - \Phi_-(R_1, r_{c_2})] \right\},
\end{aligned} \tag{1.55}$$

$$\begin{aligned}
E_{self}^{b_2} &= \frac{Db_2^2}{2} \\
&\times \left\{ \cos^2(\alpha_0 / 2) [\Psi_1(R_4 - r_{c_3}) - \Psi_1(r_{c_3}) + \Phi_-(R_3 - r_{c_3}, 0) - \Phi_-(r_{c_3}, 0) \right. \\
&\quad + \Phi_+(R_3 - r_{c_3}, R_4) - \Phi_+(r_{c_3}, R_4) + \Phi_+(R_3, R_4 - r_{c_3}) - \Phi_+(R_3, r_{c_3})] \\
&\quad + \sin^2(\alpha_0 / 2) [\Psi_1(R_4 - r_{c_4}) - \Psi_1(r_{c_4}) + \Phi_+(R_3 - r_{c_4}, 0) - \Phi_+(r_{c_4}, 0) \\
&\quad \left. + \Phi_-(R_3 - r_{c_4}, R_4) - \Phi_-(r_{c_4}, R_4) + \Phi_-(R_3, R_4 - r_{c_4}) - \Phi_-(R_3, r_{c_4})] \right\},
\end{aligned} \tag{1.56}$$

где

$$\begin{aligned}
R_1 &= \frac{\delta}{2} \cos\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \quad R_2 = \frac{\delta}{2} \sin\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \quad R_3 = \frac{\delta}{2} \cos \frac{\alpha_0}{2}, \quad R_4 = \frac{\delta}{2} \sin \frac{\alpha_0}{2}, \\
r_{c_1} &\approx b_{1(n-1)} \cos\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \quad r_{c_2} \approx b_{1(n-1)} \sin\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \quad r_{c_3} \approx b_2 \cos \frac{\alpha_0}{2}, \\
r_{c_4} &\approx b_2 \sin \frac{\alpha_0}{2}.
\end{aligned}$$

Энергии взаимодействия $E_{int}^{B_{n-1}-b_{1(n-1)}}$ и $E_{int}^{B_{n-1}-b_2}$ (в расчете на один период h) вычисляются как работы по зарождению диполей скользящих $\pm \vec{b}_{1(n-1)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций в суммарном поле бесконечного ряда диполей разностных $\pm \vec{B}_{n-1}$ -дислокаций. В результате получаем следующие формулы:

$$\begin{aligned}
E_{int}^{B_{n-1}-b_{1(n-1)}} &= 2DB_{n-1}b_{1(n-1)} \\
&\left\{ \cos \varphi_{n-1} \cos(\alpha_{n-1} - \alpha_0 / 2) [\Phi_+(x_1, R_2 + y_1) - \Phi_+(R_1 - x_1, y_1)] \right. \\
&\quad + \sin \varphi_{n-1} \sin(\alpha_{n-1} - \alpha_0 / 2) [\Phi_-(x_1, R_2 + y_1) - \Phi_-(R_1 - x_1, y_1)] \\
&\quad \left. + \sin(\varphi_{n-1} + \alpha_{n-1} - \alpha_0 / 2) [\Psi_2(R_1, R_2 + y_1) + \Psi_2(R_1 - x_1, y_1)] \right\},
\end{aligned} \tag{1.57}$$

$$E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_2} = 2DB_{n-1}b_2 \left\{ \cos \varphi_{n-1} \cos(\alpha_0 / 2) [\Phi_+(x_2, R_4 + y_2) - \Phi_+(R_3 - x_2, y_2)] \right. \\ \left. + \sin \varphi_{n-1} \sin(\alpha_0 / 2) [\Phi_-(x_2, R_4 + y_2) - \Phi_-(R_3 - x_2, y_2)] \right. \\ \left. + \sin(\alpha_0 / 2 - \varphi_{n-1}) [\Psi_2(R_3, R_4 + y_2) + \Psi_2(R_3 - x_2, y_2)] \right\}, \quad (1.58)$$

$$\text{где } x_1 = \frac{l_{1(n-1)} + \delta}{2} \cos\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \quad x_2 = \frac{l_{2(n-1)} + \delta}{2} \cos \frac{\alpha_0}{2}, \\ y_1 = \frac{l_{1(n-1)} - \delta}{2} \sin\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \quad y_2 = \frac{l_{2(n-1)} - \delta}{2} \sin \frac{\alpha_0}{2}.$$

Аналогично формулам (1.57), (1.58) записывается выражение для энергии $E_{\text{int}}^{b_{1(n-1)}-b_2}$:

$$E_{\text{int}}^{b_{1(n-1)}-b_2} = 2Db_{1(n-1)}b_2 \\ \left\{ \cos(\alpha_0 / 2) \cos(\alpha_{n-1} - \alpha_0 / 2) [\Phi_+(x_3, R_2 + y_3) - \Phi_+(R_1 - x_3, y_3)] \right. \\ \left. + \sin(\alpha_0 / 2) \sin(\alpha_{n-1} - \alpha_0 / 2) [\Phi_-(x_3, R_2 + y_3) - \Phi_-(R_1 - x_3, y_3)] \right. \\ \left. + \sin \alpha_{n-1} [\Psi_2(R_1, R_2 + y_3) + \Psi_2(R_1 - x_3, y_3)] \right\}, \quad (1.59)$$

где $x_3 = R_1 + R_3$, $y_3 = y_1 + y_2$.

Энергия дефектной системы (в расчете на один период h) после n -ой трансформации зернограничных дислокаций на тройных стыках (Рис. 1.10b) состоит из следующих слагаемых:

$$W_n = E_{\text{self}}^{B_n} + E_{\text{self}}^{b_{1(n)}} + E_{\text{self}}^{b_2} + E_c^{B_n} + E_c^{b_{1(n)}} + E_c^{b_2} \\ + E_{\text{int}}^{B_n-b_{1(n)}} + E_{\text{int}}^{B_n-b_2} + E_{\text{int}}^{b_{1(n)}-b_2} + W_b + E_\tau, \quad (1.60)$$

где $E_{\text{self}}^{B_n}$, $E_{\text{self}}^{b_{1(n)}}$ и $E_{\text{self}}^{b_2}$ – соответственно собственные упругие энергии бесконечного ряда диполей разностных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{B}_n$ и двух бесконечных рядов диполей скользящих зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}_{1(n)}$ и $\pm \vec{b}_2$; $E_c^{B_n}$, $E_c^{b_{1(n)}}$ и $E_c^{b_2}$ – энергии ядер разностных и скользящих дислокаций; $E_{\text{int}}^{B_n-b_{1(n)}}$ и $E_{\text{int}}^{B_n-b_2}$ – энергии упругого взаимодействия соответственно между рядом диполей разностных $\pm \vec{B}_n$ -дислокаций и двумя рядами диполей скользящих $\pm \vec{b}_{1(n)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций; $E_{\text{int}}^{b_{1(n)}-b_2}$ – энергия упругого взаимодействия между рядами

диполей скользящих $\pm \vec{b}_{1(n-1)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций; W_b – энергетический барьер, который необходимо преодолеть зернограничным \vec{b}_2 - и $-\vec{b}_2$ -дислокациям для прохода через соответствующие тройные стыки; E_τ – работа, совершаемая внешним сдвиговым напряжением τ по перемещению зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}_{1(n-1)}$ и $\pm \vec{b}_2$ соответственно на расстояния $(l_{1(n-1)} - \delta)/2$ и $(l_{2(n-1)} - \delta)/2$.

Энергии $E_c^{b_2}$ и $E_{self}^{b_2}$ остаются неизменными и определяются соответственно формулами (1.53) и (1.56).

Выражения для собственных энергий $E_{self}^{B_n}$ и $E_{self}^{b_{1(n)}}$ легко получить соответственно из формул (1.54) и (1.55) простой заменой B_{n-1}, φ_{n-1} и $l_{2(n-1)}$ на B_n, φ_n и $l_{2(n)}$ (для $E_{self}^{B_n}$) и $b_{1(n-1)}, \alpha_{n-1}$ на $b_{1(n)}, \alpha_n$ (для $E_{self}^{b_{1(n)}}$):

$$E_{self}^{B_n} = E_{self}^{B_{n-1}} (B_{n-1} \rightarrow B_n, \varphi_{n-1} \rightarrow \varphi_n, l_{2(n-1)} \rightarrow l_{2(n)}), \quad (1.61)$$

$$E_{self}^{b_{1(n)}} = E_{self}^{b_{1(n-1)}} (b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n). \quad (1.62)$$

Энергии $E_c^{B_n}$ и $E_c^{b_{1(n)}}$ получаются из формул (1.51) и (1.52) заменой B_{n-1} и $b_{1(n-1)}$ на B_n и $b_{1(n)}$:

$$E_c^{B_n} = E_c^{B_{n-1}} (B_{n-1} \rightarrow B_n), \quad (1.63)$$

$$E_c^{b_{1(n)}} = E_c^{b_{1(n-1)}} (b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}). \quad (1.64)$$

Аналогичным образом из формул (1.57)-(1.59) получаются выражения для энергий взаимодействия $E_{int}^{B_n - b_{1(n)}}$, $E_{int}^{B_n - b_2}$ и $E_{int}^{b_{1(n-1)} - b_2}$:

$$E_{int}^{B_n - b_{1(n)}} = E_{int}^{B_{n-1} - b_{1(n-1)}} (B_{n-1} \rightarrow B_n, b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}, \varphi_{n-1} \rightarrow \varphi_n, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n, l_{1(n-1)} \rightarrow l_{1(n)}), \quad (1.65)$$

$$E_{int}^{B_n - b_2} = E_{int}^{B_{n-1} - b_2} (B_{n-1} \rightarrow B_n, \varphi_{n-1} \rightarrow \varphi_n, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n, l_{2(n-1)} \rightarrow l_{2(n)}), \quad (1.66)$$

$$E_{int}^{b_{1(n-1)} - b_2} = E_{int}^{b_{1(n-1)} - b_2} (b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n, l_{1(n-1)} \rightarrow l_{1(n)}, l_{2(n-1)} \rightarrow l_{2(n)}). \quad (1.67)$$

Для высоты энергетического барьера W_b из соображений размерности и порядка величины примем оценку

$$W_b = 2Gb_2^2 k, \quad (1.68)$$

где k – безразмерный подгоночный параметр.

Суммарная работа напряжения τ по перемещению четырех зернограничных дислокаций, определяется выражением:

$$E_\tau = \tau b_{1(n-1)} (l_{1(n-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{n-1} - \alpha_0) + \tau b_2 (l_{2(n-1)} - \delta) \cos \alpha_0. \quad (1.69)$$

С помощью формул (1.50)-(1.69) составим разность $\Delta W_n = W_n - W_{n-1}$ полных энергий дефектной системы. Условие $\Delta W_n = 0$ позволяет найти критическое напряжение τ_n^{crit} , которое необходимо для преодоления скользящими зернограничными дислокациями барьера W_b и других барьеров, связанных с взаимодействием между дислокациями. Таким образом, находим:

$$\tau_n^{crit} = - \frac{\tilde{W}_n - W_{n-1}}{b_{1(n-1)} (l_{1(n-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{n-1} - \alpha_0) + b_2 (l_{2(n-1)} - \delta) \cos \alpha_0}, \quad (1.70)$$

где $\tilde{W}_n = W_n - E_\tau$.

1.3.2 Испускание решеточных дислокаций тройным стыком границ зерен

Постоянный рост вектора Бюргера разностной дислокации приводит к значительному увеличению энергии дефектной системы. Естественным процессом релаксации зернограничной структуры может служить испускание из тройного стыка границ зерен полной или частичной, которая способна двигаться внутри одного из прилегающих к тройному стыку зерен вдоль существующих плоскостей скольжения. Испускание решеточной дислокации становится энергетически выгодным при достижении вектором Бюргера разностной дислокации некоторой критической величины.

Сравнительный расчет энергетических характеристик испускания из тройного стыка границ зерен полных и частичных дислокаций показал, что в рассмотренном диапазоне параметров дефектной системы энергетически наиболее выгодным является процесс испускания полных решеточных дислокаций. Сравнительный расчет энергетических характеристик испускания из тройного стыка границ зерен полных и частичных дислокаций показал, что в рассмотренном диапазоне параметров дефектной системы энергетически наиболее выгодным является процесс испускания полных решеточных дислокаций. Рассмотрим, на примере тройного стыка AOB , возможный сценарий дальнейшей эволюции зернограничной дефектной структуры после $(n-1)$ -ого элементарного акта межзеренного скольжения. К этому моменту в точке O тройного стыка границ зерен формируется разностная дислокация с вектором Бюргера \vec{B}_{n-1} и происходит смещение тройного стыка на расстояние $(n-1)b_2$ (Рис. 1.12а). Предполагается, что после n -ого элементарного акта зернограничного скольжения вектор Бюргера \vec{B}_n разностной дислокации достиг критического значения, необходимого для испускания полной решеточной дислокации в одно из зерен, прилегающих к тройному стыку (Рис. 1.12с). Величина вектора Бюргера \vec{b}_e решеточной дислокации определяется из кристаллографии конкретного материала. Угол испускания θ рассчитывается из условия наибольшей энергетической выгоды испускания дислокации вдоль направления, задаваемого этим углом. Испущенная решеточная дислокация пересекает зерно и останавливается у противоположной межзеренной границы. В тройном стыке остается некоторая разностная дислокация с вектором Бюргера $\vec{b}'_n = \vec{B}_n - \vec{b}_e$.

Рассмотрим энергетические характеристики первого испускания полной решеточной дислокации из тройного стыка границ зерен. Процесс испускания характеризуется энергиями (в расчете на один период h дефектной структуры) W_{n-1} до и W'_n после испускания (соответственно, Рис. 1.12а и 1.12с). Такая

трансформация дефектной системы является энергетически выгодной при выполнении условия $\Delta W'_n = W'_n - W_{n-1} < 0$.

Полная энергия дефектной системы W_{n-1} в $(n-1)$ -ом состоянии остается прежней и определяется выражением (1.50).

Полная энергия дефектной системы W'_n после испускания полной решеточной дислокации состоит из следующих слагаемых:

$$W'_n = E_{self}^{b'_n} + E_{self}^{b_{1(n)}} + E_{self}^{b_2} + E_{self}^{b_e} + E_c^{b'_n} + E_c^{b_{1(n)}} + E_c^{b_2} + E_c^{b_e} + E_{int}^{b'_n - b_{1(n)}} + E_{int}^{b'_n - b_2} + E_{int}^{b_{1(n)} - b_2} + E_{int}^{b_e - b'_n} + E_{int}^{b_e - b_{1(n)}} + E_{int}^{b_e - b_2} + W_b + E'_\tau, \quad (1.71)$$

где $E_{self}^{b'_n}$, $E_{self}^{b_{1(n)}}$, $E_{self}^{b_2}$ и $E_{self}^{b_e}$ – собственные упругие энергии соответственно бесконечного ряда диполей разностных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}'_n$, двух бесконечных рядов диполей скользящих зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}_{1(n)}$ и $\pm \vec{b}_2$ и бесконечного ряда диполей испущенных решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций; $E_c^{b'_n}$, $E_c^{b_{1(n)}}$, $E_c^{b_2}$ и $E_c^{b_e}$ – энергии дислокационных ядер соответственно разностных и скользящих зернограничных, а также решеточных дислокаций; $E_{int}^{b'_n - b_{1(n)}}$ и $E_{int}^{b'_n - b_2}$ – энергии упругого взаимодействия между рядом диполей разностных $\pm \vec{b}'_n$ -дислокаций и соответственно двумя рядами диполей скользящих $\pm \vec{b}_{1(n)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций; $E_{int}^{b_{1(n)} - b_2}$ – энергия упругого взаимодействия между рядами диполей скользящих $\pm \vec{b}_{1(n)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций; $E_{int}^{b_e - b'_n}$, $E_{int}^{b_e - b_{1(n)}}$, $E_{int}^{b_e - b_2}$ – энергии упругого взаимодействия ряда диполей испущенных решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций соответственно с рядом диполей разностных $\pm \vec{b}'_n$ -дислокаций и двумя рядами диполей скользящих зернограничных $\pm \vec{b}_{1(n)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций; W_b – энергетический барьер, который необходимо преодолеть зернограничным \vec{b}_2 - и $-\vec{b}_2$ -дислокациям для перехода через соответствующие тройные стыки; E'_τ – работа, совершаемая внешним сдвиговым напряжением τ по перемещению зернограничных

дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}_{1(n-1)}$ и $\pm \vec{b}_2$ соответственно на расстояния $(l_{1(n-1)} - \delta)/2$ и $(l_{2(n-1)} - \delta)/2$, а также пары решеточных дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \vec{b}_e$.

Энергии $E_{self}^{b_{1(n)}}$, $E_{self}^{b_2}$, $E_c^{b_{1(n)}}$, $E_c^{b_2}$, $E_{int}^{b_{1(n-1)}-b_2}$ и W_b даются соответственно формулами (1.52), (1.62), (1.56), (1.63), (1.53), (1.67) и (1.68).

Выражения для энергий $E_{self}^{b'_n}$, $E_c^{b'_n}$, $E_{int}^{b'_n-b_{1(n)}}$ и $E_{int}^{b'_n-b_2}$ могут быть получены соответственно из формул (1.61), (1.63), (1.65) и (1.66) с помощью переобозначений:

$$E_{self}^{b'_n} = E_{self}^{B_n} (B_n \rightarrow b'_n, \varphi_n \rightarrow -\psi_n), \quad (1.72)$$

$$E_c^{b'_n} = E_c^{B_n} (B_n \rightarrow b'_n), \quad (1.73)$$

$$E_{int}^{b'_n-b_{1(n)}} = E_{int}^{B_n-b_{1(n)}} (B_n \rightarrow b'_n, \varphi_n \rightarrow -\psi_n), \quad (1.74)$$

$$E_{int}^{b'_n-b_2} = E_{int}^{B_n-b_2} (B_n \rightarrow b'_n, \varphi_n \rightarrow -\psi_n), \quad (1.75)$$

где ψ_n – угол, задающий ориентацию вектора Бюргерса \vec{b}'_n ,

$\psi_n = \arcsin \frac{b_e}{b'_n} \sin(\theta - \varphi_n) - \varphi_n$, b'_n – величина этого вектора,

$$b'_n = \sqrt{B_n^2 + b_e^2 - 2B_n b_e \cos(\theta - \varphi_n)}.$$

На один период h дефектной системы приходится две испущенные решеточные \vec{b}_e -дислокации. Вклад от ядер этих дислокаций определяется формулой:

$$E_c^{b_e} = D b_e^2. \quad (1.76)$$

Собственная упругая энергия $E_{self}^{b_e}$ бесконечного ряда диполей решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций (в расчете на один период h) вычисляется аналогично собственной энергии (1.54) бесконечного ряда диполей разностных дислокаций. Для $E_{self}^{b_e}$ получаем формулу:

$$\begin{aligned}
E_{self}^{b_e} &= \frac{Db_e^2}{2} \\
&\times \left\{ \cos^2 \theta [\Psi_1(y_e - r_{c_{e1}}) - \Psi_1(r_{c_{e1}}) + \Phi_-(x_e - r_{c_{e1}}, 0) - \Phi_-(r_{c_{e1}}, 0)] \right. \\
&\quad + \Phi_+(x_e - r_{c_{e1}}, y_e) - \Phi_+(r_{c_{e1}}, y_e) + \Phi_+(x_e, y_e - r_{c_{e1}}) - \Phi_+(x_e, r_{c_{e1}})] \\
&\quad + \sin^2 \theta [\Psi_1(y_e - r_{c_{e2}}) - \Psi_1(r_{c_{e2}}) + \Phi_+(x_e - r_{c_{e2}}, 0) - \Phi_+(r_{c_{e2}}, 0)] \\
&\quad \left. + \Phi_-(x_e - r_{c_{e2}}, y_e) - \Phi_-(r_{c_{e2}}, y_e) + \Phi_-(x_e, y_e - r_{c_{e2}}) - \Phi_-(x_e, r_{c_{e2}})] \right\}, \tag{1.77}
\end{aligned}$$

где $r_{c_{e1}} \approx b_e \cos \theta$, $r_{c_{e2}} \approx b_e \sin \theta$, $x_e = x_0 - 2p_1 \cos \theta$, $y_e = h - y_0 - 2p_1 \sin \theta$.

Энергии взаимодействия $E_{int}^{b_e - b'_n}$, $E_{int}^{b_e - b_{1(n)}}$ и $E_{int}^{b_e - b_2}$ рассчитываются аналогично формулам (1.57) и (1.58), что дает

$$\begin{aligned}
E_{int}^{b_e - b'_n} &= 2Db'_n b_e \left\{ \cos \psi_n \cos \theta [\Phi_+(x'_0 - x_0, y'_0 + y_0) - \Phi_+(x'_0, y'_0)] \right. \\
&\quad - \sin \psi_n \sin \theta [\Phi_-(x'_0 - x_0, y'_0 + y_0) - \Phi_-(x'_0, y'_0)] \\
&\quad \left. + \sin(\theta - \psi_n) [\Psi_2(x'_0 - x_0, y'_0 + y_0) - \Psi_2(x'_0, y'_0)] \right\}, \tag{1.78}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_{int}^{b_e - b_{1(n)}} &= 2Db_e b_{1(n)} \left\{ \cos \theta \cos(\alpha_n - \alpha_0 / 2) [\Phi_+(x'_1, R_2 + y'_1) - \Phi_+(R_1 - x'_1, y'_1)] \right. \\
&\quad + \sin \theta \sin(\alpha_n - \alpha_0 / 2) [\Phi_-(x'_1, R_2 + y'_1) - \Phi_-(R_1 - x'_1, y'_1)] \\
&\quad \left. + \sin(\theta + \alpha_n - \alpha_0 / 2) [\Psi_2(R_1, R_2 + y'_1) + \Psi_2(R_1 - x'_1, y'_1)] \right\}, \tag{1.79}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_{int}^{b_e - b_2} &= 2Db_e b_2 \left\{ \cos \theta \cos(\alpha_0 / 2) [\Phi_+(x'_2, R_4 + y'_2) - \Phi_+(R_3 - x'_2, y'_2)] \right. \\
&\quad + \sin \theta \sin(\alpha_0 / 2) [\Phi_-(x'_2, R_4 + y'_2) - \Phi_-(R_3 - x'_2, y'_2)] \\
&\quad \left. + \sin(\alpha_0 / 2 - \theta) [\Psi_2(R_3, R_4 + y'_2) + \Psi_2(R_3 - x'_2, y'_2)] \right\}, \tag{1.80}
\end{aligned}$$

где $x'_0 = p_1 \cos \theta$, $x'_1 = x_1 - p_1 \cos \theta$, $x'_2 = x_2 - p_1 \cos \theta$, $y'_0 = p_1 \sin \theta$,
 $y'_1 = y_1 - p_1 \sin \theta$, $y'_2 = y_2 + p_1 \sin \theta$.

Работа E'_τ внешнего сдвигового напряжения τ по перемещению зернограничных и решеточных дислокаций, которые приходятся на один период h , записывается следующим образом:

$$\begin{aligned}
E'_\tau &= \tau b_{1(n-1)} (l_{1(n-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{n-1} - \alpha_0) \\
&\quad + \tau b_2 (l_{2(n-1)} - \delta) \cos \alpha_0 - 2\tau b_e p_1 \cos 2\theta. \tag{1.81}
\end{aligned}$$

Здесь p_1 – расстояние, которое проходит испущенная \vec{b}_e -дислокация.

С помощью формул (1.50) и (1.71) составим разность $\Delta W'_n = W'_n - W_{n-1}$ полных энергий дефектной системы после и до испускания ряда диполей решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций. Построим зависимости $\Delta W'_n$ от расстояния p_1 , пройденного испущенными решеточными \vec{b}_e -дислокациями, для нанокристаллического алюминиевого сплава (Al-5Mg-2Li). Модуль сдвига G и коэффициент Пуассона ν равны соответственно 28.5 GPa и 0.34 [113]. За величины $b_{1(n)}$ и b_2 векторов Бюргерса зернограничных дислокаций примем характерное значение 0.1 nm. Величины векторов Бюргерса полной решеточной дислокации и краевой компоненты частичной дислокации следуют из кристаллографии ГЦК решетки алюминиевого сплава $b_e \approx 0.287$ nm $b'_e \approx 0.144$ nm [113]. Для размера зерна примем следующую оценку: $d \approx l = 100$ nm. Пусть плечо δ диполей зернограничных дислокаций будет равно 5 nm, а угол θ испускания решеточной дислокации – 5° . В случае испускания частичной дислокации в формулу (1.71) следует добавить слагаемое $E_\gamma = p_1\gamma$, связанное с энергией дефекта упаковки, который возникает за частичной \vec{b}'_e -дислокацией. Для величины энергии дефекта упаковки используем оценку $\gamma = 120$ mJ/m², которая соответствует верхней границе расчетной γ (от 104 до 122 mJ/m²) и нижней границе измеренной экспериментально γ (от 120 до 142 mJ/m²) в алюминии [80-82].

На Рис. 1.13 представлены результаты расчета зависимостей $\Delta W'_n(p_1)$ для полных (сплошные линии) и частичных (штриховые линии) дислокаций при различных значениях начального угла раствора тройного стыка $\alpha_0 = 120^\circ$ (1), 140° (2) и 160° (3). Эти кривые строились на n -ом шаге зернограничной деформации, когда мощность вектора Бюргерса разностной дислокации B_n достигала некоторого критического значения $B_n = B_n^{crit}$. Для всех кривых $B_n^{crit} \approx 0.3$ nm. Как видно из Рис. 1.13, в указанном диапазоне параметров модельной системы (главным образом – при выбранном размере зерна

$d = 100 \text{ nm}$) испускание полных решеточных дислокаций энергетически более выгодно, чем испускание частичных. При $B_n < 0.3 \text{ nm}$ испускание как частичных, так и полных дислокаций оказывается энергетически невыгодным.

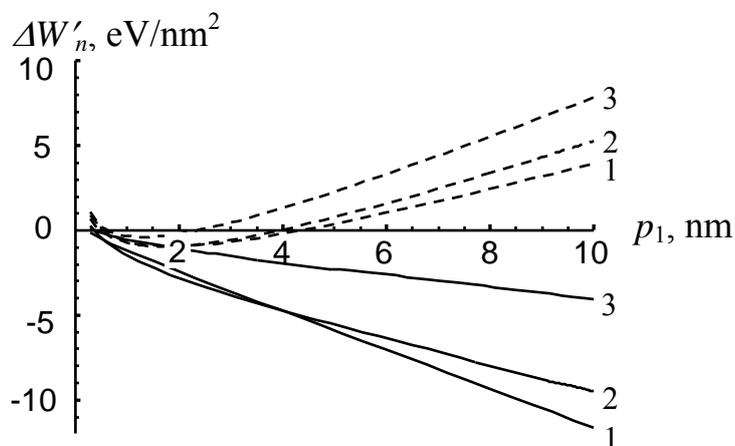


Рис. 1.13 Зависимости разности полных энергий $\Delta W'_n$ от расстояния p_1 для полных (сплошные линии) и частичных (пунктирные линии) решеточных дислокаций при различных значениях угла $\alpha_0 = 120^\circ$ (1), 140° (2) и 160° (3).

Как уже отмечалось, после испускания полная решеточная дислокация пересекает зерно и захватывается его противоположной границей. В рамках модели, процесс пересечения зерна полной решеточной дислокацией рассматривается как элементарный акт решеточного скольжения, которое вместе с межзерненным скольжением дает вклад в общую пластическую деформацию образца.

После первого испускания полной решеточной дислокации происходит повторное накопление мощности разностной дислокации. При достижении ее вектором Бюргера некоторого нового критического значения процесс испускания решеточной дислокации повторяется. В предлагаемой модели вторая испущенная \vec{b}_e -дислокация скользит внутри зерна вдоль плоскости скольжения под углом θ , но не достигает противоположной межзеренной границы из-за упругого взаимодействия с первой решеточной \vec{b}_e -дислокацией. Вторая \vec{b}_e -дислокация отталкивается первой и занимает некоторое равновесное положение p_2 в теле зерна.

Затем процесс испускания полных решеточных \vec{b}_e -дислокаций из тройных стыков зерен многократно повторяется. Каждая последующая \vec{b}_e -дислокация проходит все меньшее расстояние p_i внутри зерна, встречая сильное противодействие со стороны ранее испущенных дислокаций. При каждом испускании \vec{b}_e -дислокации ранее испущенные дислокации несколько продвигаются вперед, перемещаясь в новые равновесные положения.

В результате в материале формируется новая дефектная структура, представляющая собой зерна, пересеченными скоплениями решеточных \vec{b}_e -дислокаций (Рис. 1.14а).

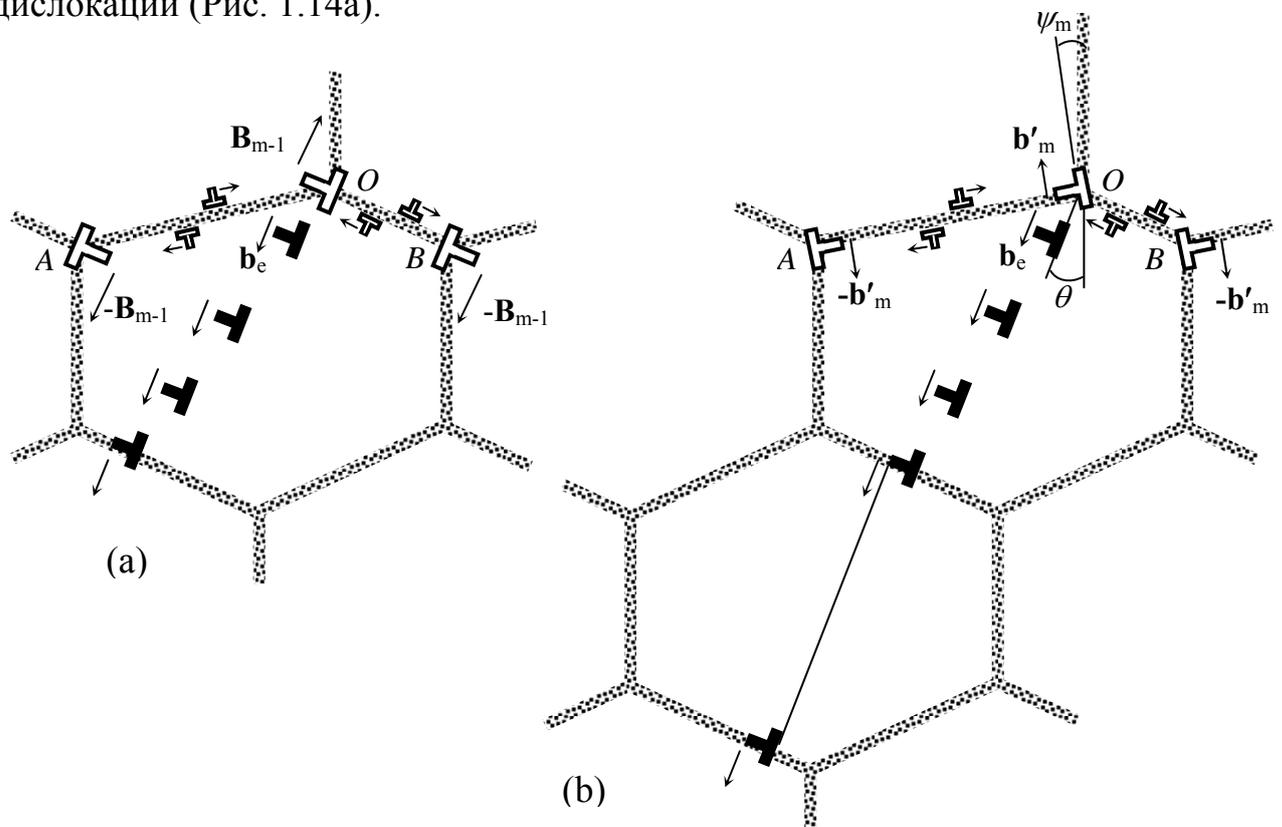


Рис. 1.14 Образование скопления решеточных дислокаций (а) и испускание решеточной дислокации из границы зерна (б).

Со временем наступает момент, когда испускание очередной решеточной дислокации становится невозможным из-за высокого энергетического барьера, созданного уже накопленными \vec{b}_e -дислокациями. В модели предполагается, что к этому моменту отталкивающее действие на первую испущенную \vec{b}_e -

дислокацию со стороны остальных \vec{b}_e -дислокаций достигает критического значения и первая \vec{b}_e -дислокация проходит сквозь границу зерна в тело следующего зерна (Рис. 1.14b). Считается, что эта дислокация целиком испускается из границы и двигается внутри зерна до следующей межзеренной границы.

Уход первой \vec{b}_e -дислокации позволяет испустить очередную решеточную дислокацию. При этом вторая \vec{b}_e -дислокация доходит до границы зерна. Испускание следующей решеточной дислокации опять оказывается энергетически невыгодным. Предполагается, что снова происходит испускание второй \vec{b}_e -дислокации в тело следующего зерна.

Таким образом, с этого момента каждое последующие испускание полной решеточной дислокации из тройного стыка границ зерен сопровождается испусканием решеточной дислокации, которая достигла границы, в прилегающее зерно. В результате в следующем зерне также образуется скопление \vec{b}_e -дислокаций.

Рассмотрим энергетические характеристики k -ого испускания полной решеточной дислокации. Испускание k -ой дислокации из тройного стыка границ зерен сопровождается переходом дефектной системы из состояния с полной энергией W'_{m-1} в состояние с полной энергией W'_m , где $m > n$. Такой переход является энергетически выгодным при выполнении условия $\Delta W'_m = W'_m - W'_{m-1} < 0$.

Полная энергия дефектной системы W'_{m-1} в $(m-1)$ -ом состоянии представляется следующим набором слагаемых:

$$W'_{m-1} = E_{self}^{B_{m-1}} + E_{self}^{b_1(m-1)} + E_{self}^{b_2} + E_{self \Sigma}^{b_e} + E_c^{B_{m-1}} + E_c^{b_1(m-1)} + E_c^{b_2} + E_{c \Sigma}^{b_e} + E_{int}^{B_{m-1}-b_1(m-1)} + E_{int}^{B_{m-1}-b_2} + E_{int}^{b_1(m-1)-b_2} + E_{int \Sigma}^{b_e-B_{m-1}} + E_{int \Sigma}^{b_e-b_1(m-1)} + E_{int \Sigma}^{b_e-b_2} + E_{int \Sigma}^{b_e}, \quad (1.82)$$

где $E_{self \Sigma}^{b_e}$ – суммарная собственная упругая энергия $(k-1)$ бесконечных рядов диполей решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций; $E_{c \Sigma}^{b_e}$ – суммарная энергия $2(k-1)$

дислокационных ядер испущенных решеточных \vec{b}_e -дислокаций; $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-B_{m-1}}$, $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_{1(m-1)}}$ и $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_2}$ – соответственно суммарные энергии упругого взаимодействия $(k-1)$ бесконечных рядов диполей испущенных решеточных $\pm\vec{b}_e$ -дислокаций с бесконечным рядом диполей разностных $\pm\vec{b}'_n$ -дислокаций и двумя бесконечными рядами диполей скользящих зернограничных $\pm\vec{b}_{1(n)}$ - и $\pm\vec{b}_2$ -дислокаций; $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e}$ – суммарная энергия упругого взаимодействия между $(k-1)$ бесконечными рядами диполей испущенных решеточных $\pm\vec{b}_e$ -дислокаций.

Все энергии в формуле (1.82) без значка суммы Σ совпадают с формулами, которые были рассчитаны выше.

После испускания $(k-1)$ -ого ряда диполей $\pm\vec{b}_e$ -дислокаций на один период h дефектной системы приходится $2(k-1)$ решеточных дислокаций, энергия ядер которых определяется формулой:

$$E_{c\Sigma}^{b_e} = 2(k-1)Db_e^2. \quad (1.83)$$

Формулы для собственной энергии $E_{\text{self}\Sigma}^{b_e}$ и энергий взаимодействия $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-B_{m-1}}$, $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_{1(m-1)}}$ и $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_2}$ получаются в результате суммирования выражений, аналогичных (1.77)-(1.80), что дает:

$$E_{\text{self}\Sigma}^{b_e} = \sum_{i=1}^{k-1} \frac{Db_e^2}{2} \times \left\{ \begin{aligned} &\cos^2 \theta [\Psi_1(y_{ei} - r_{c_{e1}}) - \Psi_1(r_{c_{e1}}) + \Phi_-(x_{ei} - r_{c_{e1}}, 0) - \Phi_-(r_{c_{e1}}, 0) \\ &+ \Phi_+(x_{ei} - r_{c_{e1}}, y_{ei}) - \Phi_+(r_{c_{e1}}, y_{ei}) + \Phi_+(x_{ei}, y_{ei} - r_{c_{e1}}) - \Phi_+(x_{ei}, r_{c_{e1}})] \\ &+ \sin^2 \theta [\Psi_1(y_{ei} - r_{c_{e2}}) - \Psi_1(r_{c_{e2}}) + \Phi_+(x_{ei} - r_{c_{e2}}, 0) - \Phi_+(r_{c_{e2}}, 0) \\ &+ \Phi_-(x_{ei} - r_{c_{e2}}, y_{ei}) - \Phi_-(r_{c_{e2}}, y_{ei}) + \Phi_-(x_{ei}, y_{ei} - r_{c_{e2}}) - \Phi_-(x_{ei}, r_{c_{e2}})] \end{aligned} \right\}, \quad (1.84)$$

где $x_{ei} = x_{0i} - 2p_i \cos \theta$, $y_{ei} = h - y_{0i} - 2p_i \sin \theta$, x_{0i} и y_{0i} – геометрические характеристики тройного стыка границ зерен, из которого была испущена i -ая решеточная дислокация;

$$E_{\text{int}\Sigma}^{b_e - B_{m-1}} = \sum_{i=1}^{k-1} 2Db'_n b_e \left\{ \cos \varphi_{m-1} \cos \theta [\Phi_+(x'_{0i} - x_0, y'_{0i} + y_0) - \Phi_+(x'_{0i}, y'_{0i})] \right. \\ \left. + \sin \varphi_{m-1} \sin \theta [\Phi_-(x'_{0i} - x_0, y'_{0i} + y_0) - \Phi_-(x'_{0i}, y'_{0i})] \right. \\ \left. + \sin(\varphi_{m-1} + \theta) [\Psi_2(x'_{0i} - x_0, y'_{0i} + y_0) - \Psi_2(x'_{0i}, y'_{0i})] \right\}, \quad (1.85)$$

$$E_{\text{int}\Sigma}^{b_e - b_{1(m-1)}} = \sum_{i=1}^{k-1} 2Db_e b_{1(m-1)} \\ \left\{ \cos \theta \cos(\alpha_{m-1} - \alpha_0 / 2) [\Phi_+(x'_{1i}, R_2 + y'_{1i}) - \Phi_+(R_1 - x'_{1i}, y'_{1i})] \right. \\ \left. + \sin \theta \sin(\alpha_{m-1} - \alpha_0 / 2) [\Phi_-(x'_{1i}, R_2 + y'_{1i}) - \Phi_-(R_1 - x'_{1i}, y'_{1i})] \right. \\ \left. + \sin(\theta + \alpha_{m-1} - \alpha_0 / 2) [\Psi_2(R_1, R_2 + y'_{1i}) + \Psi_2(R_1 - x'_{1i}, y'_{1i})] \right\}, \quad (1.86)$$

$$E_{\text{int}\Sigma}^{b_e - b_2} = \sum_{i=1}^{k-1} 2Db_e b_2 \left\{ \cos \theta \cos(\alpha_0 / 2) [\Phi_+(x'_{2i}, R_4 + y'_{2i}) - \Phi_+(R_3 - x'_{2i}, y'_{2i})] \right. \\ \left. + \sin \theta \sin(\alpha_0 / 2) [\Phi_-(x'_{2i}, R_4 + y'_{2i}) - \Phi_-(R_3 - x'_{2i}, y'_{2i})] \right. \\ \left. + \sin(\alpha_0 / 2 - \theta) [\Psi_2(R_3, R_4 + y'_{2i}) + \Psi_2(R_3 - x'_{2i}, y'_{2i})] \right\}, \quad (1.87)$$

где $x'_{0i} = p_i \cos \theta - (m-1-n_i)b_2 \cos \frac{\alpha_0}{2}$, $x'_{1i} = x_1 + (m-1-n_i)b_2 \cos \frac{\alpha_0}{2} - p_i \cos \theta$,

$x'_{2i} = x_2 + (m-1-n_i)b_2 \cos \frac{\alpha_0}{2} - p_i \cos \theta$, $y'_{0i} = p_i \sin \theta + (m-1-n_i)b_2 \sin \frac{\alpha_0}{2}$,

$y'_{1i} = y_1 - (m-1-n_i)b_2 \sin \frac{\alpha_0}{2} - p_i \sin \theta$, $y'_{2i} = y_2 + (m-1-n_i)b_2 \sin \frac{\alpha_0}{2} + p_i \sin \theta$,

а n_i – номер элементарного акта зернограничного скольжения, на котором произошло испускание i -ой решеточной дислокации.

Энергия взаимодействия $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e}$ вычисляется как сумма всех парных взаимодействий бесконечных рядов диполей решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций:

$$\begin{aligned}
E_{\text{int } \Sigma}^{b_e} = \sum_{i=1}^{k-2} \sum_{j=i+1}^{k-1} 2Db_e^2 \left\{ \cos^2 \theta [\Phi_+(x_{0i} - x'_{0ij}, h - y_{0i} - y'_{0ij}) - \Phi_+(x'_{0ij}, y'_{0ij})] \right. \\
+ \sin^2 \theta [\Phi_-(x_{0i} - x'_{0ij}, h - y_{0i} - y'_{0ij}) - \Phi_-(x'_{0ij}, y'_{0ij})] \\
\left. + \sin 2\theta [\Psi_2(x_{0i} - x'_{0ij}, h - y_{0i} - y'_{0ij}) + \Psi_2(x'_{0ij}, y'_{0ij})] \right\},
\end{aligned} \tag{1.88}$$

$$\text{где } x'_{0ij} = p_i \cos \theta - p_j \cos \theta - (n_j - n_i) \cos \frac{\alpha_0}{2},$$

$$y'_{0ij} = p_i \sin \theta - p_j \sin \theta + (n_j - n_i) \sin \frac{\alpha_0}{2}.$$

Полная энергия дефектной системы W'_m после испускания k -ой решеточной дислокации имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
W'_m = E_{\text{self}}^{b'_m} + E_{\text{self}}^{b_{1(m)}} + E_{\text{self}}^{b_2} + E_{\text{self } \Sigma}^{b_e} + E_c^{b'_m} + E_c^{b_{1(m)}} + E_c^{b_2} + E_{c \Sigma}^{b_e} + E_{\text{int}}^{b'_m - b_{1(m)}} \\
+ E_{\text{int}}^{b'_m - b_2} + E_{\text{int}}^{b_{1(m)} - b_2} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b'_m} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m)}} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_e} + W_b + E''_{\tau},
\end{aligned} \tag{1.89}$$

где $E_{\text{self } \Sigma}^{b_e}$ – суммарная собственная упругая энергия k бесконечных рядов диполей решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций; $E_{c \Sigma}^{b_e}$ – суммарная энергия $2k$ дислокационных ядер испущенных решеточных \vec{b}_e -дислокаций; $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b'_m}$, $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m)}}$ и $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2}$ – соответственно суммарные энергии упругого взаимодействия k бесконечных рядов диполей испущенных решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций с бесконечным рядом диполей разностных $\pm \vec{b}'_n$ -дислокаций и двумя бесконечными рядами диполей скользящих зернограничных $\pm \vec{b}_{1(n)}$ - и $\pm \vec{b}_2$ -дислокаций; $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e}$ – суммарная энергия упругого взаимодействия между k бесконечными рядами диполей испущенных решеточных $\pm \vec{b}_e$ -дислокаций.

Все энергии в формулах (1.82) и (1.89) без значка суммы Σ совпадают с формулами, которые были рассчитаны выше.

Выражения для энергий $E_{c \Sigma}^{b_e}$, $E_{\text{self } \Sigma}^{b_e}$, $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b'_m}$, $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m)}}$, $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2}$ и $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e}$ легко получить соответственно из формул (1.83)-(1.88), сделав следующие замены:

$$E'_{c\Sigma}{}^{b_e} = E_{c\Sigma}^{b_e}(k-1 \rightarrow k), \quad (1.90)$$

$$E'_{self\Sigma}{}^{b_e} = E_{self\Sigma}^{b_e}(k-1 \rightarrow k), \quad (1.91)$$

$$E'_{int\Sigma}{}^{b_e-b'_m} = E_{int\Sigma}^{b_e-B_{m-1}}(k-1 \rightarrow k, B_{m-1} \rightarrow b'_m, \varphi_{m-1} \rightarrow -\psi_m), \quad (1.92)$$

$$E'_{int\Sigma}{}^{b_e-b_{1(m)}} = E_{int\Sigma}^{b_e-b_{1(m-1)}}(k-1 \rightarrow k, b_{1(m-1)} \rightarrow b_{1(m)}), \quad (1.93)$$

$$E'_{int\Sigma}{}^{b_e-b_2} = E_{int\Sigma}^{b_e-b_2}(k-1 \rightarrow k), \quad (1.94)$$

$$E'_{int\Sigma}{}^{b_e} = E_{int\Sigma}^{b_e}(k-1 \rightarrow k). \quad (1.95)$$

Работа E''_τ внешнего сдвигового напряжения τ по перемещению зернограницных и k -ых испущенных решеточных дислокаций, которые приходятся на один период h , записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} E''_\tau &= \tau b_{1(m-1)}(l_{1(m-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{m-1} - \alpha_0) \\ &+ \tau b_2(l_{2(m-1)} - \delta) \cos \alpha_0 - 2\tau b_e p_k \cos 2\theta. \end{aligned} \quad (1.96)$$

С помощью формул (1.82) и (1.89) составим разность $\Delta W'_m = W'_m - W'_{m-1}$ полных энергий дефектной системы. Условие $\Delta W'_m = 0$ позволяет найти критическое напряжение τ_m^{crit} , определяющие переход системы из $(m-1)$ -ого в m -ое состояние, который характеризуется испусканием k -ой решеточной дислокации. Таким образом, для τ_m^{crit} имеем следующее выражение:

$$\tau_m^{crit} = \frac{W'_{m-1} - \tilde{W}'_m}{b_{1(m-1)}(l_{1(m-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{m-1} - \alpha_0) + b_2(l_{2(m-1)} - \delta) \cos \alpha_0 - 2b_e p_k \cos 2\theta}, \quad (1.97)$$

где $\tilde{W}'_m = W'_m - E''_\tau$.

1.3.3 Зависимость напряжения течения от общей пластической деформации

Исследуем зависимость критического сдвигового напряжения τ_n^{crit} от полной пластической деформации образца ε . В представленной модели

действуют два механизма пластичности – межзеренное и решеточное дислокационное скольжение. Элементарным актом межзеренного скольжения считается прохождение пары скользящих зернограничных дислокаций через тройной стык границ зерен. За элементарный акт решеточного скольжения в масштабе зерна принимается пересечение зерна полной решеточной дислокацией, испущенной этим тройным стыком. Оценим вклады в полную деформацию от межзеренного скольжения, как $\varepsilon_{GB} \approx nb_2/d$ и от решеточного скольжения – как $\varepsilon_{latt} \approx \sum_{i=1}^k b_e p_i / d^2$. Полную деформацию образца оценим как $\varepsilon = (1 + \lambda)(\varepsilon_{GB} + \varepsilon_{latt})$, где λ – поправочный параметр, который выбирается из условия согласия с экспериментом. Предполагается, что λ учитывает действие тех возможных деформационных механизмов (диффузионных, ротационных и т. д.), которые не были напрямую учтены в модели. Поскольку предполагается, что механизмы межзеренного и решеточного скольжения дают основные вклады в ε , величина λ должна быть существенно (в разы) меньше единицы.

Рассмотрим зависимость τ_n^{crit} , которое в рамках модели определяет напряжение течения τ_f , от степени пластической деформации ε на примере нанокристаллического алюминия. Начальный угол α_0 раствора тройных стыков положим равным 160° . Для параметра λ выберем значение 0.25. Остальные параметры дефектной системы выбираются такими же, как при построении зависимостей $\Delta W'_n(p_1)$ для испускания первой решеточной дислокации (Рис. 1.13).

Результаты численных расчетов зависимости $\tau_f(\varepsilon)$ представлены на Рис. 1.15 в виде кривой $\sigma_f(\varepsilon)$, где $\sigma_f = 2\tau_n^{crit}$. Штриховой линией дана экспериментальная кривая [42]. Очевидно, что теоретическая кривая лежит в том же диапазоне значений, что и экспериментальная. 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.

Величина вклада решеточного скольжения в сверхпластическую деформацию полностью определяется частотой испускания решеточных дислокаций, которая, в свою очередь, задается скоростью накопления мощности разностной дислокации в тройном стыке зерен. Очевидно, что скорость роста вектора Бюргера разностной дислокации в стыках с относительно малыми углами раствора (порядка $80^\circ \div 120^\circ$) выше, чем в стыках с большими углами раствора (порядка $140^\circ \div 170^\circ$).

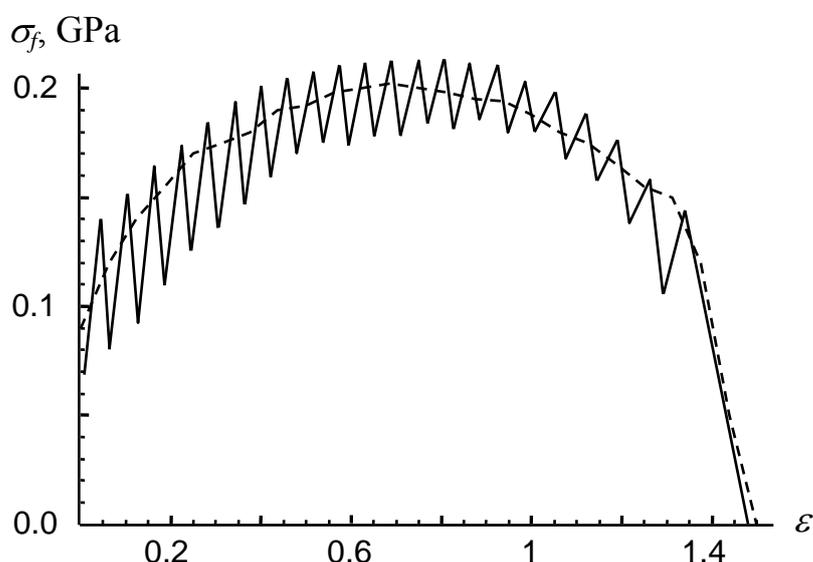


Рис. 1.15 Теоретическая (сплошная линия) и экспериментальная (пунктирная линия) кривые деформирования нанокристаллического алюминиевого сплава Al-5Mg-2Li со средним размером зерна 100 nm.

Следовательно, вклад от решеточного скольжения в деформацию будет выше в зернах, имеющих тройные стыки с малыми углами раствора. Однако, как было показано в разделе 1.1, межзеренное скольжение на стыках с малыми углами раствора затруднено. Из этого факта следует, что межзеренное скольжение в первую очередь будет развиваться на тройных стыках с большими углами раствора, объемная доля которых достаточно высока из-за неравновесности структуры НКМ, обусловленной технологией их получения. Все сказанное указывает на то, что в НКМ при сверхпластической деформации

доминирующим механизмом деформации является межзеренное скольжение. Вклад от решеточного скольжения также имеет место, но он значительно меньше. В основном, решеточное скольжение служит механизмом релаксации зернограницной структуры и сглаживает эффект упрочнения, связанный с ростом мощности разностной дислокации.

В рассмотренной модели вклад в полную деформацию ($\varepsilon \approx 1.5$) от зернограницного скольжения составлял $\varepsilon_{GB} \approx 0.7\varepsilon$, а от решеточного скольжения – $\varepsilon_{latt} \approx 0.2\varepsilon$ при начальном угле раствора тройного стыка $\alpha_0 = 160^\circ$.

Как уже отмечалось, трансформация зернограницных дислокаций на тройных стыках зерен приводит к смещению этих стыков, что сопровождается локальной миграцией границ зерен. Такой аккомодационный процесс ведет к увеличению угла раствора тройного стыка α_n , который характеризует этот стык как геометрическое препятствие для зернограницного скольжения. В результате эффект упрочнения уменьшается. С ростом числа n элементарных актов межзеренного скольжения тройные стыки образуют периодическую структуру, состоящую из сближающихся друг с другом пар (например, стыки O и B на Рис. 1.12). В пределе тройные стыки, входящие в эти пары, объединяются с образованием четверного стыка. При этом разностные дислокации, находящиеся в этих стыках аннигилируют. В итоге можно получить периодическую конфигурацию четверных стыков, лежащих в одной плоскости и соединенных прямыми границами. Вдоль этой плоскости скольжение зернограницных дислокаций осуществляется практически беспрепятственно. Таким образом, смещение тройных стыков, инициированное межзеренным скольжением, и сопутствующая миграция границ зерен приводят к разупрочнению НКМ.

Механизм упрочнения, связанный с накоплением и ростом мощности разностных дислокаций в тройных стыках зерен, конкурирует с механизмом разупрочнения, связанным с миграцией тройных стыков и испусканием

решеточных дислокаций. Именно эта конкуренция и определяет характер деформационных кривых в НКМ при сверхпластической деформации.

1.3.4 Резюме

В этой главе были рассмотрены теоретические модели, описывающие особенности сверхпластического поведения нанокристаллических материалов. Было показано, что эффективным механизмом упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации может служить межзеренное скольжение, осуществляемое путем трансформаций скользящих зернограничных дислокаций на тройных стыках границ зерен.

Стадия упрочнения объясняется упругим взаимодействием скользящих зернограничных дислокаций с разностной дислокацией в тройном стыке границ зерен, которая является результатом прохождения пар зернограничных дислокаций через тройной стык. В то же время, прохождение зернограничных дислокаций через тройной стык вызывает его смещение, сопровождающееся локальной миграцией границ зерен. Границы зерен, вдоль которых осуществляется межзеренное скольжение, постепенно разворачиваются, становясь более параллельными друг другу, что облегчает межзеренное скольжение – роль тройного стыка, как геометрического препятствия для скольжения дислокаций, уменьшается. В результате при некоторой степени пластической деформации происходит переход от упрочнения к разупрочнению, которое заканчивается разрушением нанокристаллического образца.

Численные расчеты зависимостей критического напряжения τ_n^{crit} от пластической деформации ε и их сравнение с экспериментальными данными [37,42] (Рис. 1.15) показали хорошее численное совпадение максимальных значений критического напряжения τ_n^{crit} с максимальными экспериментальными значениями напряжения течения. С помощью этих

расчетов был оценен вклад межзеренного скольжения ε_{GB} в общую пластическую деформацию ε , который составил: $\varepsilon_{GB} \approx 0.7\varepsilon$. Это указывает на то, что, кроме межзеренного скольжения, которое определяет характер сверхпластической деформации нанокристаллических материалов, должны действовать сопутствующие механизмы пластичности. Предполагается, что скольжение решеточных дислокаций может выступать в роли такого механизма аккомодации зернограничной структуры.

В рамках нашей модели, решеточные дислокации зарождались на разностных дислокациях, которые накапливались в тройных стыках границ зерен в результате трансформации зернограничных дислокаций. Испускание тройными стыками границ зерен решеточных дислокаций в тело зерна является механизмом релаксации зернограничной структуры, одновременно инициирующее решеточное скольжение, которое дает определенный вклад ε_{latt} в общую пластическую деформацию ε . Оценка этого вклада дала следующую величину: $\varepsilon_{latt} \approx 0.2\varepsilon$, что указывает на то, что решеточное скольжение в основном выступает в роли механизма релаксации, сглаживающего эффект упрочнения при сверхпластической деформации нанокристаллических материалов, одновременно давая определенный вклад в общую пластическую деформацию.

Таким образом, конкуренция между механизмом упрочнения, характеризуемого ростом мощности разностных дислокаций в тройных стыках границ зерен вследствие трансформации зернограничных дислокаций – носителей зернограничного скольжения и механизмом разупрочнения, связанным с миграцией границ зерен и их тройных стыков и испусканием ими решеточных дислокаций – носителей решеточного скольжения, определяет уникальное поведение нанокристаллических металлов и сплавов, проявляющих свойство сверхпластичности, которое открывает обширные перспективы их прикладного использования.

ГЛАВА 2

ЗАРОЖДЕНИЕ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ДВОЙНИКОВ НА ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН И ВБЛИЗИ ВЕРШИН ТРЕЩИН В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Эта глава посвящена рассмотрению теоретических моделей зарождения деформационных двойников в НКМ. 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.).

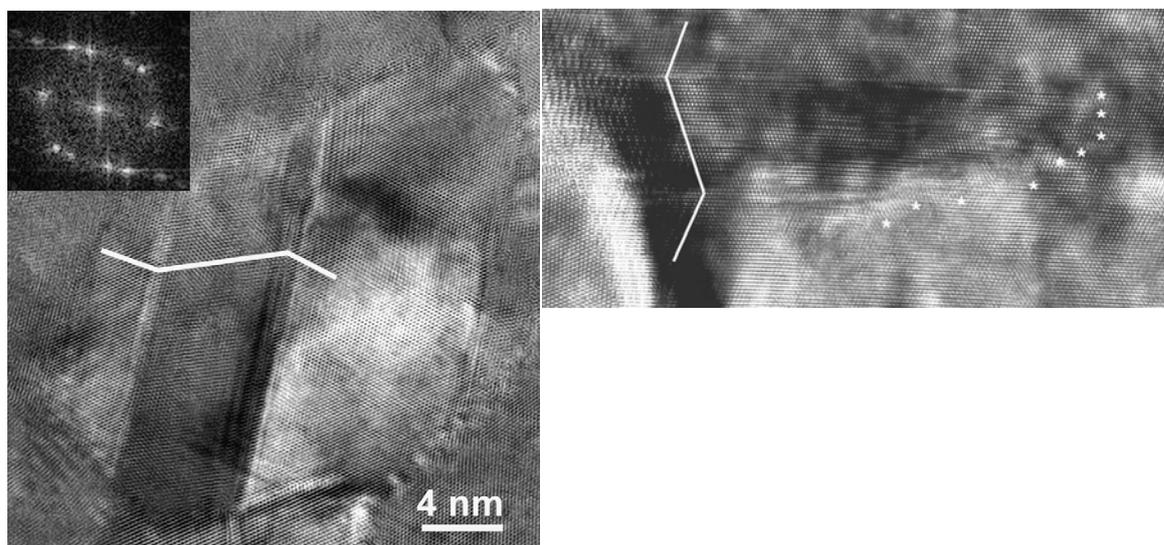


Рис. 2.1 Микроснимки деформационных двойников в нанокристаллическом никеле (Ni) [130,135].

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, исследовательские работы [126-137] и обзор [138]). На Рис. 2.1 представлены микроснимки деформационных двойников, зародившихся на границах зерен в нанокристаллическом никеле [130,135]. 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 (см. обзор [138] и связанные с ним ссылки).

Таким образом, основной целью настоящей главы является построение теоретических моделей новых микромеханизмов образования двойников на границах зерен и вблизи вершин трещин в деформируемых НКМ, а также изучение влияния зарождения нанодвойников на трещиностойкость наноматериалов. При написании Главы 2 использовались материалы из работ автора в соавторстве [2а,3а,5а,7а,16а,17а,21а,23а].

2.1 Механизм зарождения деформационного нанодвойника вблизи диполя зернограницных дисклинаций или трещины в нанокристаллических твердых телах

Давно установлено [91], 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 зернограницные дисклинации, которые часто зарождаются на границах зерен в НКМ в процессе их получения, и трещины.

В работе [139] было показано, каким образом может происходить испускание отдельных частичных дислокаций из границ зерен и их тройных

стыков, содержащих соответственно зернограничные и стыковые дислокации и дисклинации. В этих моделях предполагалось, что эмиссия частичных дислокаций происходит непосредственно из ядра дефекта (дислокации или дисклинации). Это плохо подходит для описания кооперативной эмиссии большой группы двойнивающих дислокаций, поскольку такого рода источники истощаются сразу после испускания одной или нескольких первых дислокаций.

В этом разделе предлагаются значительно более общие и «гибкие» модели гетерогенного зарождения двойнивающих дислокаций на границе зерна в поле упругих напряжений двухосного диполя клиновых зернограничных дисклинаций или вблизи вершины трещины.

2.1.1 Образование нанодвойника за счет эмиссии частичных дислокаций из границы зерна вблизи дисклинационного диполя

Рассмотрим последовательную эмиссию двойнивающих дислокаций в тело зерна из некоторого участка его границы (Рис. 2.2). Считается, что в прилегающих областях НКМ действует постоянное внешнее сдвиговое напряжение τ . Кроме того, предполагается, что этот участок границы находится в зоне действия максимального сдвигового напряжения двухосного диполя стыковых клиновых дисклинаций мощностью $\pm \omega$. Из теории прямолинейных клиновых дисклинаций [102] известно, что эта зона расположена на равном удалении от дисклинаций на расстоянии порядка половины плеча диполя от линии, соединяющей дисклинации. Далее исследуются два предельных варианта взаимной ориентации плеча диполя и испускающего дислокации участка границы: в первом случае они параллельны друг другу (Рис. 2.2а), во втором – перпендикулярны (Рис. 2.2б). В рамках используемого ниже континуального подхода процесс эмиссии двойнивающей 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 зерна, а вторая ($-b$ -дислокация) остается в границе.

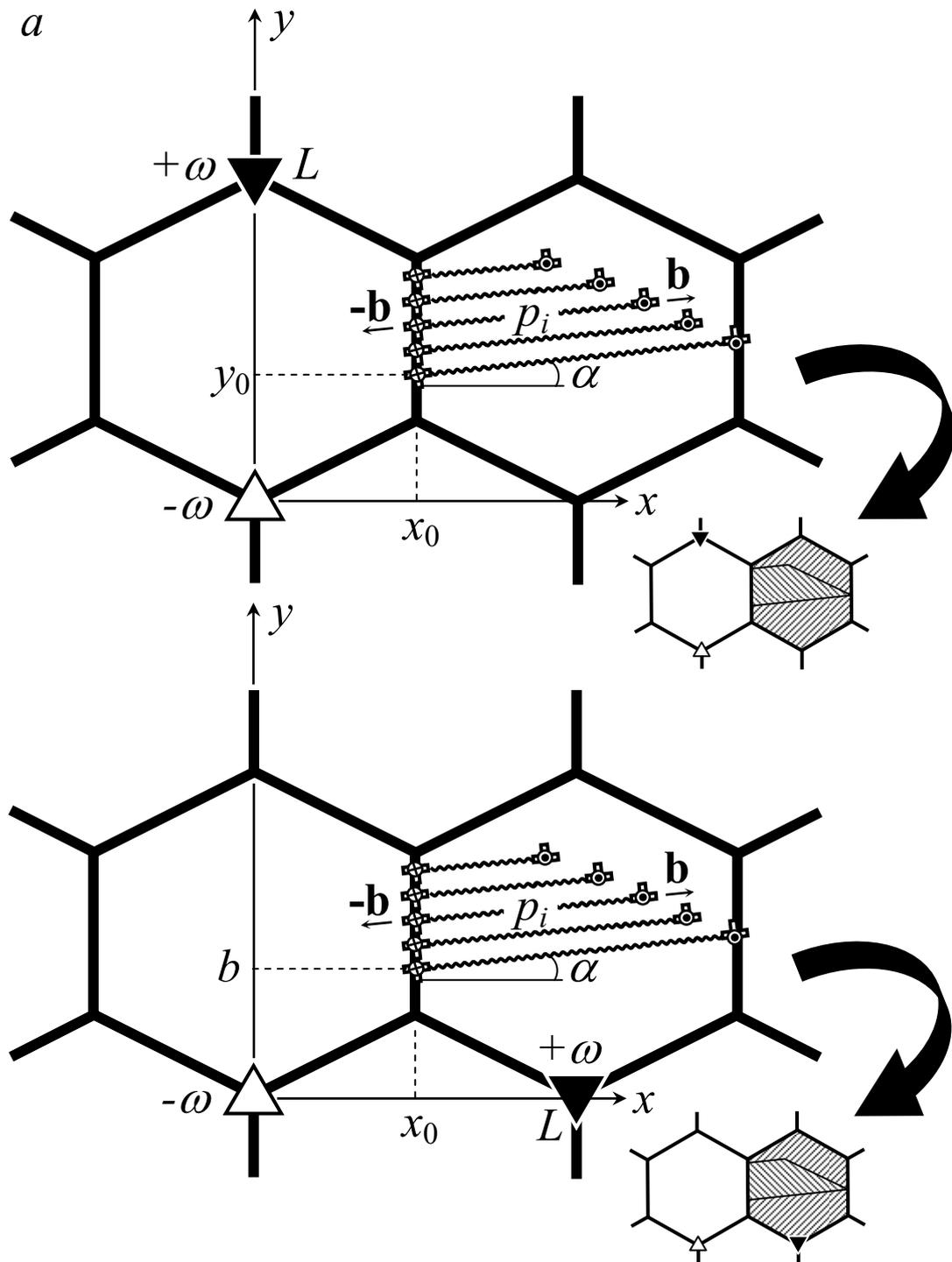


Рис. 2.2 Модель зарождения деформационного двойника на границе зерна в нанокристаллическом материале под действием внешнего приложенного напряжения τ и поля напряжений двухосного диполя стыковых клиновых дисклинаций мощностью $\pm \omega$. Плечо диполя ориентировано вдоль (a) или поперек (b) границы зерна.

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. 2.2). Ориентация плоскостей скольжения задается углом α (Рис. 2.2), а расстояние между ними определяется кристаллографией конкретного материала.

Используемый в модели отдельный диполь клиновых дисклинаций, расположенных в соседних тройных стыках границ зерен, служит источником дополнительных локальных напряжений, которые инициируют зарождение частичных дислокаций. Рассмотрение отдельного диполя стыковых дисклинаций основано на предположение, что среднее расстояние между диполями в данном НКМ существенно (в несколько раз) больше, чем среднее плечо диполя L . При этом эффективным радиусом R экранировки упругих полей диполей в самом грубом приближении может служить половина среднего расстояния между диполями.

В рамках предложенной модели эмиссия первой b -дислокации становится возможным 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, которые, с одной

стороны, не позволяют второй b -дислокации пройти дальше первой, а с другой стороны, смещают первую b -дислокацию вперед в новое положение устойчивого равновесия. При испускании последующих b -дислокаций все повторяется. 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. По мере развития этого процесса часть b -дислокаций достигает противоположной границы зерна. Результатом такой последовательной эмиссии b -дислокаций и перекрытия тянущихся за ними полос дефекта упаковки становится образование достаточно толстой двойниковой пластины (см. врезки на Рис. 2.2).

Рассмотрим зарождение первого диполя частичных дислокаций с векторами Бюргера $\pm \mathbf{b}$ (диполя $\pm b$ -дислокаций) на примере дефектной конфигурации, показанной на Рис. 2.2а. Зарождение диполя энергетически выгодно, если разность между полными энергиями (в расчете на единицу длины дислокаций) после (W_2) и до (W_1) зарождения диполя станет отрицательной: $\Delta W = W_2 - W_1 < 0$.

Исходная дефектная конфигурация представляет собой двухосный диполь клиновых дисклинаций мощностью $\pm \omega$ (диполь стыковых $\pm \omega$ -дисклинаций) с плечом L . Полную энергию такой конфигурации можно записать в виде [102]:

$$W_1 = E_{self}^{\Delta} = \frac{D\omega^2 L^2}{2} \left(\ln \frac{R}{L} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.1)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона.

Конечная конфигурация состоит из того же самого диполя стыковых $\pm \omega$ -дисклинаций и диполя частичных $\pm b$ -дислокаций. Полная энергия такой конфигурации определяется суммой:

$$W_2 = E_{self}^{\Delta} + E_{self}^b + E_{int}^{\Delta-b} + E_{\gamma} + E_{\tau}, \quad (2.2)$$

где E_{self}^b – полная собственная энергия диполя частичных $\pm b$ -дислокаций, $E_{int}^{\Delta-b}$ – энергия упругого взаимодействия диполя стыковых $\pm \omega$ -дисклинаций с диполем частичных $\pm b$ -дислокаций, E_γ – энергия дефекта упаковки и E_τ – энергия взаимодействия приложенного касательного напряжения τ с краевой компонентой b -дислокаций.

Полная собственная энергия диполя частичных $\pm b$ -дислокаций дается известным выражением [108]:

$$E_{self}^b = Db_1^2 \left(\ln \frac{p - r_{c1}}{r_{c1}} + 1 \right) + D(1 - \nu)b_2^2 \left(\ln \frac{p - r_{c2}}{r_{c2}} + 1 \right), \quad (2.3)$$

где p – расстояние, пройденное в зерне b -дислокацией, $r_{c1} \approx b_1$ и $r_{c2} \approx b_2$ – соответственно радиусы обрезания полей напряжений краевой и винтовой составляющих b -дислокации.

Расчет энергии упругого взаимодействия диполя стыковых $\pm \omega$ -дисклинаций с диполем частичных $\pm b$ -дислокаций проводился стандартным образом, путем зарождения дислокационного диполя в поле сдвиговых напряжений дисклинационного (для примера см. [102,108]). Окончательное выражение для энергии $E_{int}^{\Delta-b}$ имеет следующий вид:

$$E_{int}^{\Delta-b} = \frac{Db_1\omega}{2} \left((y_0 - L \cos \alpha) \ln \left[1 + \frac{p^2 + 2px_0 - 2Lp \sin \alpha}{L^2 + x_0^2 + y_0^2 - 2Ly_0 \cos \alpha - 2Lx_0 \sin \alpha} \right] - y_0 \ln \left[1 + \frac{p^2 + 2px_0}{x_0^2 + y_0^2} \right] \right), \quad (2.4)$$

где x_0 и y_0 – координаты точки зарождения первого диполя $\pm b$ -дислокаций в системе координат, показанной на Рис. 2.2.

Энергия дефекта упаковки E_γ определяется очевидным выражением:

$$E_\gamma = \gamma b, \quad (2.5)$$

где γ – удельная поверхностная энергия дефекта упаковки.

Энергия E_τ равна работе, которая совершается при перемещении частичной b -дислокации на расстояние p под действием внешнего касательного напряжения τ :

$$E_\tau = -\tau b_1 p \cos 2\alpha. \quad (2.6)$$

С помощью формул (2.1)-(2.6) можно получить изменение полной энергии системы $\Delta W = W_2 - W_1$ в результате зарождения диполя частичных $\pm b$ -дислокаций:

$$\begin{aligned} \Delta W = & \frac{Db_1\omega}{2} \left((y_0 - L \cos \alpha) \ln \left[1 + \frac{p^2 + 2px_0 - 2Lp \sin \alpha}{L^2 + x_0^2 + y_0^2 - 2Ly_0 \cos \alpha - 2Lx_0 \sin \alpha} \right] \right. \\ & \left. - y_0 \ln \left[1 + \frac{p^2 + 2px_0}{x_0^2 + y_0^2} \right] \right) + Db_1^2 \left(\ln \frac{p - r_{c_1}}{r_{c_1}} + 1 \right) \\ & + D(1 - \nu) b_2^2 \left(\ln \frac{p - r_{c_2}}{r_{c_2}} + 1 \right) + \gamma p - \tau b_1 p \cos 2\alpha. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Рассмотрим, как меняются разность энергий ΔW по мере продвижения частичной b -дислокации в глубь зерна на расстояние p . Расчеты проводились на примере нанокристаллических Cu и Al для следующих значений параметров модели [91,140]. Для Cu: $G = 44$ GPa, $\nu = 0.38$, $\gamma = 45$ mJ m⁻², $b_1 \approx 0.128$ nm и $b_2 \approx 0.02$ nm; для Al: $G = 27$ GPa, $\nu = 0.31$, $\gamma = 120$ mJ m⁻², $b_1 \approx 0.143$ nm и $b_2 \approx 0.022$ nm. Мощность ω дисклинационного диполя и длина его плеча были взяты соответственно равными $\omega = 0.5$ и $L = 30$ nm. В качестве места зарождения первого диполя частичных $\pm b$ -дислокаций была выбрана точка с координатами $x_0 = y_0 = L/2$ при $\alpha = 0^\circ$. Именно в этой точке на частичную b -дислокацию действует максимальное отталкивающее сдвиговое напряжение со стороны дисклинационного диполя, а в плоскости скольжения, ориентированной под углом $\alpha = 0^\circ$, внешнее сдвиговое напряжение τ достигает наибольшей величины.

Результаты численного расчета зависимости $\Delta W(p)$ для первой (Рис. 2.2a) и второй (Рис. 2.2b) дефектных конфигураций при различных значениях

τ показаны соответственно на Рис. 2.3а,b и 2.3с,d. Видно, что как для Cu (Рис. 2.3а,с), так и для Al (Рис. 2.3b,d) существует некоторое критическое значение напряжения τ_c , при котором зарождение диполя частичных $\pm b$ -дислокаций становится возможным (что соответствует неравенству $\Delta W < 0$).

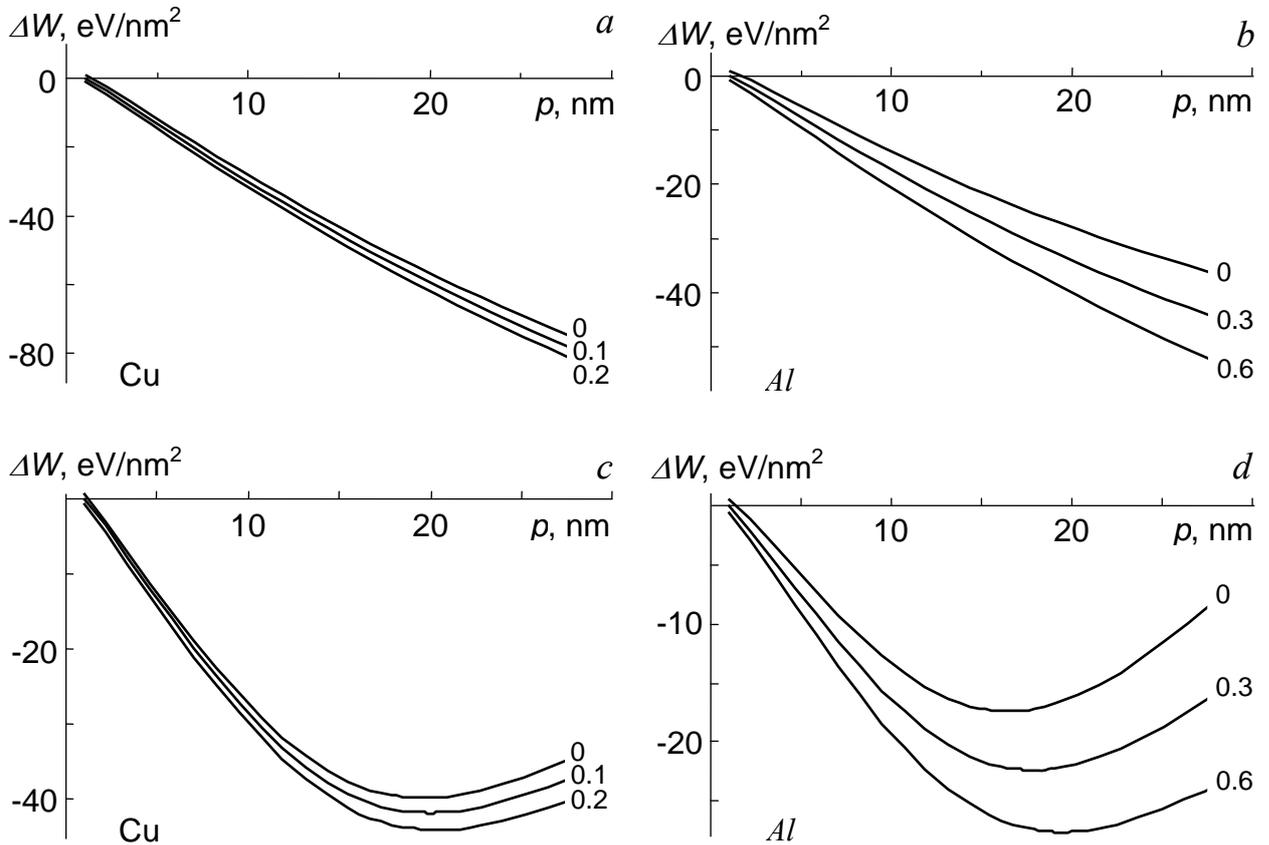


Рис. 2.3 Зависимость изменения энергии системы ΔW при эмиссии двойнивающей дислокации от расстояния p , пройденного этой дислокацией в нанокристаллических Cu (a,c) и Al (b,d). Плечо дисклинационного диполя ориентировано вдоль (a,b) или поперек (c,d) границы зерна. Числами у кривых указаны значения внешнего сдвигового напряжения τ в единицах GPa.

Величину этого критического напряжения можно определить из условия $\Delta W(p = p^*) = 0$, где $p^* = 1$ nm – такое наименьшее расстояние, пройденное первой b -дислокацией от границы зерна, при котором данная континуальная модель уже оказывается достаточно корректной. Кроме того, это расстояние соответствует обычной толщине неравновесных границ зерен

в НКМ, полученных интенсивной пластической деформацией, так что рассмотрение зависимости $\Delta W(p)$ при $p < p^*$ просто лишено всякого смысла. Как видно из Рис. 2.3, при $p = p^*$ функция $\Delta W(p)$ достигает наибольших значений, так что выполнение равенства $\Delta W(p = p^*) = 0$ гарантирует, что $\Delta W < 0$ при $p > p^*$. В случае нанокристаллических Cu и Al это уравнение соответственно дает $\tau_c \approx 100$ и 300 МПа.

Рассмотрим, как влияет ориентация дисклинационного диполя на вид кривых $\Delta W(p)$. Во-первых, обе выбранные для анализа ориентации диполя (Рис. 2.2а и 2.2b) дают одинаковые критические напряжения τ_c , поскольку в обоих случаях первая b -дислокация испускается из точки, где сдвиговое напряжение дисклинационного диполя максимально и одинаково для обеих его ориентаций. Поэтому начальные участки кривых $\Delta W(p)$ на Рис. 2.3а,b и 2.3с,d практически совпадают. Во-вторых, последующие участки этих кривых существенно отличаются: при первой ориентации диполя (Рис. 2.2а) функция $\Delta W(p)$ монотонно убывает (Рис. 2.3а,b), при второй (Рис. 2.2b) – сначала убывает, достигает минимума и затем возрастает (Рис. 2.3с,d). Это означает, что в первом случае частичной b -дислокации энергетически выгодно беспрепятственно пересечь зерно и дойти до противоположной границы, а во втором – перейти в положение устойчивого равновесия внутри зерна. Это отличие объясняется особенностями распределения поля сдвиговых напряжений дисклинационного диполя. В первом случае (Рис. 2.2а) испущенная b -дислокация на протяжении всего своего пути (при $\alpha = 0^\circ$) остается в зоне действия медленно убывающего положительного сдвигового напряжения диполя, во втором (Рис. 2.2b) – в зоне действия быстро убывающего знакопеременного (сначала положительного, а затем отрицательного) сдвигового напряжения диполя. В последнем случае положение устойчивого равновесия оказывается вблизи от линии нулевого уровня этого напряжения (точное положение равновесия определяется балансом действующих на дислокацию сил, обусловленных внешним

напряжением τ , напряжением дисклинационного диполя и уширением полосы дефекта упаковки; с ростом τ положение равновесия смещается к противоположной границе зерна).

В рамках принятой модели образование деформационного двойника происходит путем последовательной эмиссии двойникующих дислокаций из границы зерна (Рис. 2.2). Обобщая подход, рассмотренный в предыдущем разделе, на случай многих двойникующих дислокаций, 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 $\Delta W_n = W_n - W_{n-1} < 0$. Выражение $\Delta W_n = 0$ позволяет найти критическое напряжение $\tau_c^{(n)}$ перехода дефектной системы из $(n-1)$ -ого состояния в n -ое. Расчет энергетических характеристик системы проведем на примере дефектной конфигурации, показанной на Рис. 2.2а. В случае дефектной конфигурации, изображенной на Рис. 2.2б, расчеты выполняются аналогично, с учетом иной ориентации дисклинационного диполя.

В $(n-1)$ -ом состоянии полная энергия дефектной системы определяется выражением:

$$W_{n-1} = E_{self}^{\Delta} + E_{self\Sigma}^{b(n-1)} + E_{int\Sigma}^{\Delta-b(n-1)} + E_{int\Sigma}^{b-b(n-1)} + E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)} + E_{\tau\Sigma}^{(n-1)}, \quad (2.8)$$

где $E_{self\Sigma}^{b(n-1)}$ – суммарная собственная энергия $n-1$ диполей частичных $\pm b$ -дислокаций, $E_{int\Sigma}^{\Delta-b(n-1)}$ – суммарная энергия упругого взаимодействия между диполем стыковых $\pm \omega$ -дисклинаций и всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций, $E_{int\Sigma}^{b-b(n-1)}$ – суммарная энергия упругого взаимодействия между всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций, $E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)}$ – суммарная

энергия всех $(n-1)$ дефектов упаковки, $E_{\Sigma}^{(n-1)}$ – суммарная энергия взаимодействия внешнего сдвигового напряжения τ со всеми $(n-1)$ частичными b -дислокациями.

Полная собственная энергия всех $(n-1)$ диполей частичных $\pm b$ -дислокаций представляет собой сумму их собственных энергий, определяемых формулой (2.3):

$$E_{self\Sigma}^{b(n-1)} = D \sum_{i=1}^{n-1} \left\{ b_1^2 \left(\ln \frac{p_i - r_{c_1}}{r_{c_1}} + 1 \right) + (1-\nu) b_2^2 \left(\ln \frac{p_i - r_{c_2}}{r_{c_2}} + 1 \right) \right\}, \quad (2.9)$$

где p_i – расстояние, пройденное i -ой частичной b -дислокацией.

Энергия упругого взаимодействия между диполем стыковых $\pm \omega$ -дисклинаций и всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций дается аналогичной суммой:

$$E_{int\Sigma}^{\Delta-b(n-1)} = \frac{Db_1\omega}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \left((y_i - L \cos \alpha) \ln \left[1 + \frac{p_i^2 + 2p_i x_0 - 2Lp_i \sin \alpha}{L^2 + x_0^2 + y_i^2 - 2Ly_i \cos \alpha - 2Lx_0 \sin \alpha} \right] - y_i \ln \left[1 + \frac{p_i^2 + 2p_i x_0}{x_0^2 + y_i^2} \right] \right), \quad (2.10)$$

где y_i – ордината точки зарождения i -ого диполя частичных $\pm b$ -дислокаций в системе координат, показанной на Рис. 2.2а.

Энергия упругого взаимодействия между i -ым и j -ым диполями частичных $\pm b$ -дислокаций рассчитывается путем зарождения i -ого диполя в поле сдвиговых напряжений j -ого диполя. Энергия $E_{int\Sigma}^{b-b(n-1)}$ представляет собой суммарную энергию всех таких парных взаимодействий между дислокационными диполями и может быть записана в виде двойной суммы по индексам i и j :

$$E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n-1)} = \frac{Db^2}{2} \sum_{i=1}^{n-2} \sum_{j=i+1}^{n-1} \left\{ 2y_{ij}^2 \left(\frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij} - 2p_i p_j}{(p_j^2 + x_{ij}^2 + y_{ij}^2 + 2p_j x_{ij})(p_j^2 + p_i^2 + x_{ij}^2 + y_{ij}^2 + 2p_j x_{ij} - 2p_i x_{ij} - 2p_i p_j)} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij}}{(x_{ij}^2 + y_{ij}^2)(p_j^2 + x_{ij}^2 + y_{ij}^2 - 2p_i x_{ij})} \right) + \ln \left[1 + \frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij}}{x_{ij}^2 + y_{ij}^2} \right] - \ln \left[1 + \frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij} - 2p_i p_j}{p_j^2 + x_{ij}^2 + y_{ij}^2 + 2p_j x_{ij}} \right] \right\}, \quad (2.11)$$

где $x_{ij} = (y_j - y_i) \sin \alpha$, $y_{ij} = (y_j - y_i) \cos \alpha$.

Суммарная энергия всех $(n-1)$ полос дефекта упаковки очевидно равна

$$E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)} = \begin{cases} \gamma p_1, & n-1=1; \\ \gamma(p_1 + p_2), & n-1 \geq 2. \end{cases} \quad (2.12)$$

Суммарная энергия взаимодействия внешнего сдвигового напряжения τ со всеми $(n-1)$ частичными b -дислокациями определяется формулой:

$$E_{\tau\Sigma}^{(n-1)} = -b_1 \tau \cos 2\alpha \sum_{i=1}^{n-1} p_i. \quad (2.13)$$

Полная энергия системы в n -ом состоянии состоит из следующих слагаемых:

$$W_n = E_{\text{self}}^{\Delta} + E_{\text{self}\Sigma}^{b(n)} + E_{\text{int}\Sigma}^{\Delta-b(n)} + E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n)} + E_{\gamma\Sigma}^{(n)} + E_{\tau\Sigma}^{(n)}. \quad (2.14)$$

Расчет энергий, входящих в формулу (2.14), полностью аналогичен расчету соответствующих энергий в формуле (2.8), с учетом замены n на $n-1$ и определением новых положений устойчивого равновесия p_i ранее испущенных частичных b -дислокаций.

Таким образом, определены все слагаемые выражений для энергий W_{n-1} и W_n , составляющих разность $\Delta W_n = W_n - W_{n-1}$.

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: $\partial \Delta W_n / \partial p_i = 0$. Для определения \tilde{p}_i использовался следующий алгоритм численных расчетов. Положение \tilde{p}_1 устойчивого равновесия первой испущенной b -дислокации находили из уравнения $\partial \Delta W_1 / \partial p_1 = 0$, где $\Delta W_1 = \Delta W$ определяется выражением (2.7). Фиксируя это значение \tilde{p}_1 , рассчитывали положение \tilde{p}_2 устойчивого

равновесия второй испущенной b -дислокации как решение уравнения $\partial\Delta W_2 / \partial p_2 \big|_{p_1=\tilde{p}_1} = 0$, где $\Delta W_2 = W_2 - W_1$. Энергии W_1 и W_2 определяются соответственно выражениями (2.7) и (2.14) при $n = 2$. Используя найденное таким образом значение \tilde{p}_2 , из уравнения $\partial\Delta W_2 / \partial p_1 \big|_{p_2=\tilde{p}_2} = 0$ находили новое, скорректированное значение для \tilde{p}_1 . В свою очередь, это скорректированное значение для \tilde{p}_1 использовалось для коррекции значения \tilde{p}_2 , которое определялось как решение уравнения $\partial\Delta W_2 / \partial p_2 \big|_{p_1=\tilde{p}_1} = 0$. Затем новое, скорректированное значение для \tilde{p}_2 использовалось для новой коррекции значения \tilde{p}_1 на следующей итерации и т. д. Такая итерационная процедура коррекции выполнялась до тех пор, пока значения \tilde{p}_1 и \tilde{p}_2 не сходились к некоторым постоянным величинам. Эти величины считались установленными положениями устойчивого равновесия первой и второй двойникующих дислокаций (для $n = 2$). Аналогичные численные процедуры выполнялись и в общем случае для произвольного числа n . По этому алгоритму были рассчитаны положения \tilde{p}_i (где $i = 1, \dots, n$) устойчивого равновесия для n двойникующих дислокаций.

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 стыковых $\pm \omega$ -дисклинаций. Расчеты проводились на примере нанокристаллических Cu и Al при тех же значениях параметров модели, которые использовались при построении кривых на Рис. 2.3. Результаты показаны на Рис. 2.4а (первая дефектная конфигурация) и 2.4б (вторая дефектная конфигурация) для Cu (кривые 1-3) и Al (кривые 1'-3') при $\omega = 0.5$ (кривые 1, 1'), 0.4 (кривые 2, 2') и 0.3 (кривые 3, 3'). Видно, что во всех

случаях на начальной стадии образования двойника наблюдается рост критического напряжения τ_c (первая стадия локального упрочнения).

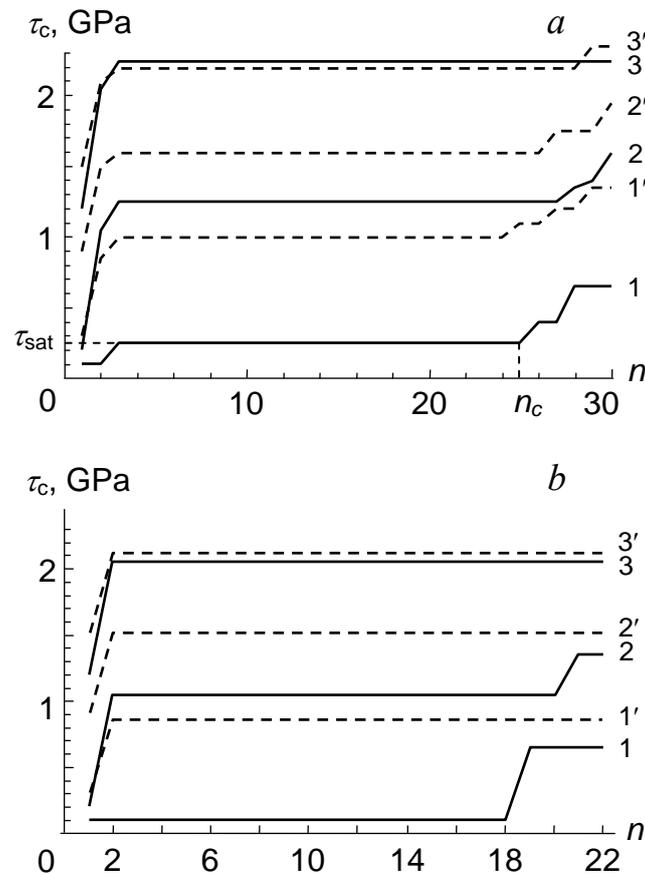


Рис. 2.4 Зависимость критического напряжения τ_c эмиссии двойнивающей дислокации от ее порядкового номера n в нанокристаллических Cu (кривые 1-3) и Al (кривые 1'-3') при различных значениях мощности дисклинационного диполя: $\omega = 0.5$ (кривые 1, 1'), 0.4 (кривые 2, 2') и 0.3 (кривые 3, 3'). Плечо диполя ориентировано вдоль (a) или поперек (b) границы зерна.

Достигнув некоторого уровня τ_{sat} , кривая $\tau_c(n)$ выходит на насыщение и до определенного момента не зависит от числа n испущенных частичных b -дислокаций (стадия локального течения за счет утолщения двойниковой пластины). Наконец, для испускания частичной дислокации с номером, превышающим некоторое критическое число n_c , снова требуется повышение критического напряжения (вторая стадия локального упрочнения). Из представленных на Рис. 2.4 зависимостей также видно, что как для Cu, так и для Al незначительное снижение мощности ω дисклинационного диполя ведет к очень существенному росту критического напряжения.

На Рис. 2.5 приведены результаты численного расчета зависимостей положений устойчивого равновесия p_{eq} от номера n испущенных частичных b -дислокаций для первой (Рис. 2.5a,b) и второй (рис. 2.5c,d) дефектных конфигураций при различных значениях мощности ω дисклинационного диполя.

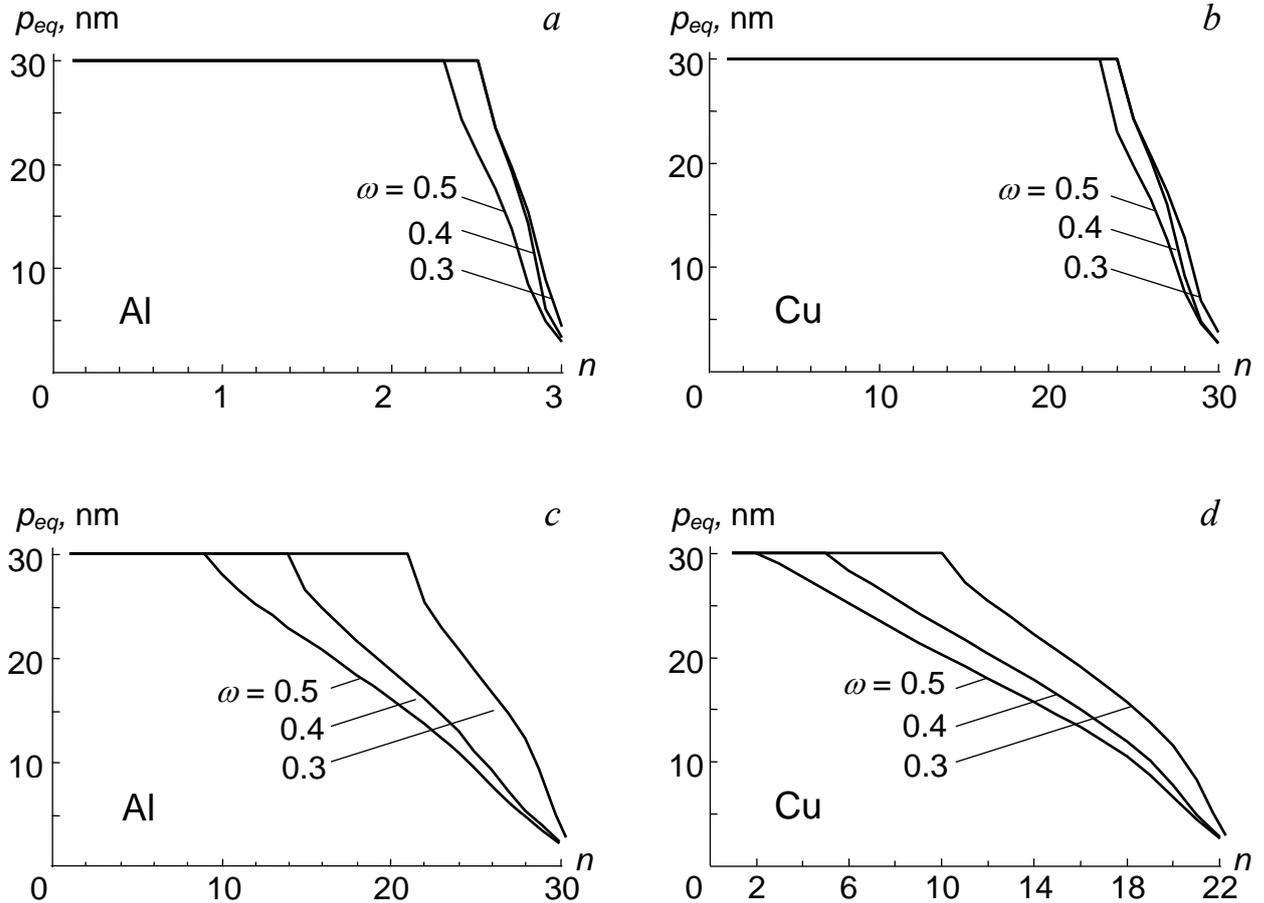


Рис. 2.5 Зависимость равновесного положения p_{eq} двойнивающей дислокации от ее порядкового номера n в нанокристаллических Al (a,c) и Cu (b,d) при различных значениях мощности дисклинационного диполя: $\omega = 0.3, 0.4$ и 0.5 . Плечо диполя ориентировано вдоль (a,b) или поперек (c,d) границы зерна.

По сути дела, эти зависимости показывают конфигурацию фронта деформационного двойника. В обоих случаях двойниковая пластина у своего основания (у той границы зерна, на которой зарождается двойник) имеет конечную толщину, определяемую критическим числом n_c . При этом, в первом случае (Рис. 2.5a,b) большинство частичных дислокаций,

образующих двойник, пересекает зерно, что придает продольному сечению двойниковой пластины приблизительно прямоугольную форму.

Во втором случае частичные дислокации более равномерно распределяются в зерне, что приводит к явной трапецевидной и даже к клиновидной форме двойника (Рис. 2.5c,d). Тот факт, что уменьшение мощности ω дисклинационного диполя приводит к утолщению двойниковой пластины, объясняется просто: при этом резко растет критическое напряжение $\tau_c \approx \tau_{sat}$ (Рис. 2.4), которое нужно приложить, чтобы обеспечить устойчивое утолщение двойниковой пластины за счет эмиссии двойникующих дислокаций. Естественно, что при таком высоком постоянном напряжении эти дислокации проходят по зерну дальше, чем при низких напряжениях, соответствующих бóльшим ω . Соответственно, и двойниковая пластина становится при этом относительно толще. Этот эффект сильнее выражен (Рис. 2.5c,d) в случае второй ориентации дисклинационного диполя (Рис. 2.2b), когда его упругое поле быстро убывает и меняет знак вдоль линий скольжения двойникующих дислокаций.

Таким образом, в случае зарождения деформационного двойника вблизи дисклинационного диполя относительно малой мощности нужно приложить достаточно высокое внешнее напряжение, чтобы обеспечить формирование двойниковой пластины, причем эта пластина будет относительно более толстой и по форме ближе к прямоугольной. Если же зарождение двойника происходит вблизи дисклинационного диполя относительно большой мощности, то оно будет развиваться при относительно малых внешних напряжениях, и двойниковая пластина будет относительно тонкой и по форме ближе к клиновидной. Влияние мощности дисклинационного диполя на толщину и форму двойниковой пластины слабо проявляется в случае первой ориентации диполя (Рис. 2.2a) и сильно – в случае второй (Рис. 2.2b).

Сделаем численные оценки толщины двойниковой пластины для первой ориентации дисклинационного диполя, когда его мощность слабо

влияет на геометрию пластины. В этом случае в нанокристаллических Al и Cu толщина двойниковой пластины определяется приблизительно равными критическими числами испущенных двойниующих дислокаций $n_c \approx 24-30$ (рис. 2.5a,b). Взяв расстояние δ между соседними атомными плоскостями $\{111\}$ как $\delta_{Al} \approx 0.234 \text{ nm}$ и $\delta_{Cu} \approx 0.207 \text{ nm}$, получаем оценки толщины двойниковой пластины: $\approx 5.6-7 \text{ nm}$ для Al и $\approx 5-6 \text{ nm}$ для Cu. Нижние пределы соответствуют наибольшим значениям мощности дисклинационного диполя ω и наименьшим значениям критического внешнего напряжения τ_c , и наоборот, верхние пределы – наименьшим ω и наибольшим τ_c . 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) [126-128].

2.1.2 Образование нанодвойника за счет эмиссии частичных дислокаций из границы зерна вблизи вершины трещины

В этом разделе будут рассмотрены условия реализации механизма зарождения деформационных двойников на границах зерен (предложенного в разделе 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 зернограницной дислокации, находящейся вблизи вершины трещины.

Рассмотрим двумерную модель нанокристаллического материала, находящегося под действием внешнего растягивающего напряжения σ (Рис. 2.6). Предполагается, что под действием этого напряжения в наноматериале

развивается плоская трещина длиной L (Рис. 2.6), как трещина одновременно плоского сдвига и нормального разрыва. В рамках модели трещина распространяется вдоль направления действия максимальных касательных напряжений τ (Рис. 2.6). Далее в совместном поле внешнего сдвигового напряжения τ и напряжений, создаваемых трещиной, вблизи вершины трещины зарождается скользящая решеточная дислокация с вектором Бюргера \mathbf{B} (B -дислокация), которая под действием этого поля перемещается в направлении перпендикулярном направлению распространения трещины (Рис. 2.6). 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 Бюргера \mathbf{b} (b -дислокации) с последующей эмиссией этой дислокации из границы зерна.

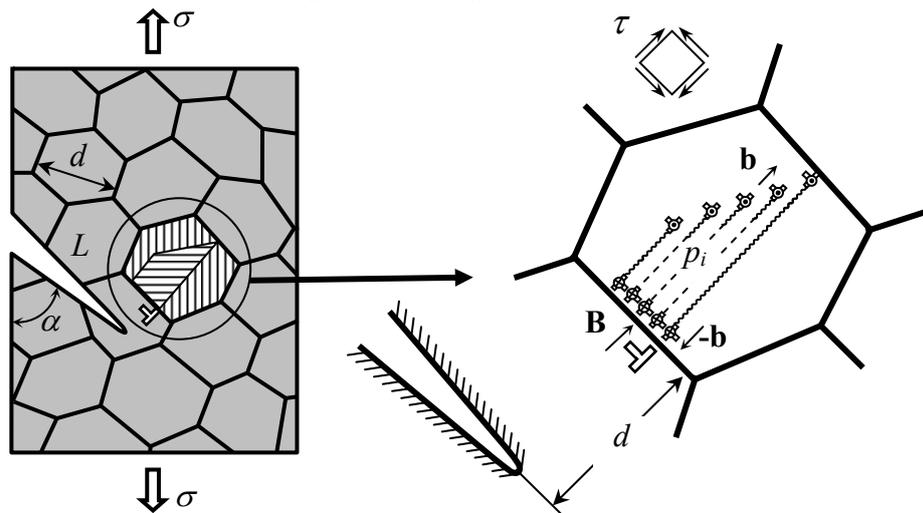


Рис. 2.6 Модель зарождения деформационного двойника на границе зерна в нанокристаллическом материале под действием внешнего приложенного напряжения τ и поля напряжений плоской трещины длиной L .

В рамках предложенной модели эмиссия первой b -дислокации становится возможным 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, которые, с одной стороны, не позволяют второй b -дислокации пройти дальше первой, а с другой стороны, смещают первую b -дислокацию вперед в новое положение устойчивого равновесия. При испускании последующих b -дислокаций все повторяется. 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. По мере развития этого процесса часть b -дислокаций достигает противоположной границы зерна. Результатом такой последовательной эмиссии b -дислокаций и перекрытия тянущихся за ними полос дефекта упаковки становится образование достаточно толстой двойниковой пластины (см. врезки на Рис. 2.6).

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 $\Delta W_n = W_n - W_{n-1} < 0$. Расчет энергетических характеристик системы проведем на примере дефектной конфигурации, показанной на Рис. 2.6.

В $(n-1)$ -ом состоянии полная энергия дефектной системы определяется выражением:

$$W_{n-1} = E_{self}^B + E_{self\Sigma}^{b(n-1)} + E_{int}^{C-B} + E_{int\Sigma}^{C-b(n-1)} + E_{int\Sigma}^{B-b(n-1)} + E_{int\Sigma}^{b-b(n-1)} + E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)} + E_{z\Sigma}^{(n-1)},$$

$$(2.15)$$

где E_{self}^B – собственная энергия B -дислокации, $E_{self\Sigma}^{b(n-1)}$ – суммарная собственная энергия $n-1$ диполей частичных $\pm b$ -дислокаций, E_{int}^{C-B} – энергия упругого взаимодействия трещины с B -дислокацией, $E_{int\Sigma}^{C-b(n-1)}$ – суммарная энергия упругого взаимодействия между трещиной и всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций, $E_{int\Sigma}^{B-b(n-1)}$ – суммарная энергия упругого взаимодействия между B -дислокацией и всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций, $E_{int\Sigma}^{b-b(n-1)}$ – суммарная энергия упругого взаимодействия между всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций, $E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)}$ – суммарная энергия всех сохранившихся дефектов упаковки, $E_{\tau\Sigma}^{(n-1)}$ – суммарная энергия взаимодействия внешнего сдвигового напряжения τ со всеми $(n-1)$ частичными b -дислокациями.

Полная собственная энергия B -дислокации дается известным выражением [91]:

$$E_{self}^B = \frac{DB^2}{2} \left(\ln \frac{R}{B} + 1 \right), \quad (2.16)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, R – радиус экранирования поля напряжений B -дислокации.

Полная собственная энергия всех $(n-1)$ диполей частичных $\pm b$ -дислокаций представляет собой сумму их собственных энергий и определяется формулой (2.3):

$$E_{self\Sigma}^{b(n-1)} = D \sum_{i=1}^{n-1} \left\{ b_1^2 \left(\ln \frac{p_i - r_{c_1}}{r_{c_1}} + 1 \right) + (1-\nu) b_2^2 \left(\ln \frac{p_i - r_{c_2}}{r_{c_2}} + 1 \right) \right\}, \quad (2.17)$$

где p_i – расстояние, пройденное i -ой частичной b -дислокацией, $r_{c_1} \approx b_1$ и $r_{c_2} \approx b_2$ – соответственно радиусы обрезания полей напряжений краевой и винтовой составляющих b -дислокации.

Энергия упругого взаимодействия трещины с B -дислокацией определяется как работа по зарождению B -дислокации в поле сдвиговых напряжений трещины и определяется формулой:

$$E_{\text{int}}^{C-B} = B \int_{r_c}^R (\sigma_{xy}^n + \sigma_{xy}^s)(x, y = 0) dx, \quad (2.18)$$

где σ_{xy}^n и σ_{xy}^s – сдвиговые компоненты поля напряжений, созданного внешней нагрузкой σ в теле с трещиной одновременно плоского сдвига и нормального разрыва в системе координат Oxy (см. Приложение А).

Аналогичным образом рассчитывается суммарная энергия упругого взаимодействия между трещиной и всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций:

$$E_{\text{int}\Sigma}^{C-b(n-1)} = b_1 \sum_{i=1}^{n-1} \int_{r_{c1}}^{p_i - r_{c1}} (\sigma_{xy}^n + \sigma_{xy}^s)(x, y = y_i) dx. \quad (2.19)$$

Энергия упругого взаимодействия между B -дислокацией и всеми $(n-1)$ диполями частичных $\pm b$ -дислокаций дается аналогичной суммой:

$$E_{\text{int}\Sigma}^{B-b(n-1)} = \frac{DBb_1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \left(\ln \frac{y_i^2}{y_i^2 + p_i^2} - \frac{y_i^2}{y_i^2 + p_i^2} + 1 \right), \quad (2.20)$$

где y_i – ордината точки зарождения i -ого диполя частичных $\pm b$ -дислокаций в системе координат, показанной на Рис. 2.6.

Энергия $E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n-1)}$ представляет собой суммарную энергию всех таких парных взаимодействий между дислокационными диполями и может быть записана в виде двойной суммы по индексам i и j (см. формулу (2.11)):

$$E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n-1)} = \frac{Db_1^2}{2} \sum_{i=1}^{n-2} \sum_{j=i+1}^{n-1} \left\{ 2y_{ij}^2 \left(\frac{p_i^2 - 2p_i p_j}{(p_j^2 + y_{ij}^2)(p_j^2 + p_i^2 + y_{ij}^2 - 2p_i p_j)} - \frac{p_i^2}{y_{ij}^2 (p_j^2 + y_{ij}^2)} \right) + \ln \left[1 + \frac{p_i^2}{y_{ij}^2} \right] - \ln \left[1 + \frac{p_i^2 - 2p_i p_j}{p_j^2 + y_{ij}^2} \right] \right\}, \quad (2.21)$$

где $y_{ij} = y_j - y_i$.

Суммарная энергия всех $(n-1)$ полос дефекта упаковки очевидно равна

$$E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)} = \begin{cases} \gamma p_1, & n-1 = 1; \\ \gamma(p_1 + p_2), & n-1 \geq 2. \end{cases} \quad (2.22)$$

Суммарная энергия взаимодействия внешнего сдвигового напряжения τ со всеми $(n-1)$ частичными b -дислокациями определяется формулой:

$$E_{\tau\Sigma}^{(n-1)} = -b_1\tau \sum_{i=1}^{n-1} p_i. \quad (2.23)$$

Полная энергия системы в n -ом состоянии состоит из следующих слагаемых:

$$W_n = E_{self}^B + E_{self\Sigma}^{b(n)} + E_{int}^{C-B} + E_{int\Sigma}^{C-b(n)} + E_{int\Sigma}^{B-b(n)} + E_{int\Sigma}^{b-b(n)} + E_{\gamma\Sigma}^{(n)} + E_{\tau\Sigma}^{(n)}, \quad (2.24)$$

Расчет энергий, входящих в формулу (2.24), полностью аналогичен расчету соответствующих энергий в формуле (2.15), с учетом замены n на $n-1$ и определением новых положений устойчивого равновесия p_i ранее испущенных частичных b -дислокаций. Расчет равновесных положений p_i двойникующих дислокаций аналогичен, представленному в разделе 2.1.1.

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 длины L трещины. Расчеты проводились на примере нанокристаллических Al и 3C-SiC для следующих значений параметров модели. Для Al: $G = 27$ GPa, $\nu = 0.31$ [91], $\gamma = 120$ mJ m⁻² [140], $b_1 \approx 0.143$ nm и $b_2 \approx 0.022$ nm [140]; для 3C-SiC: $G = 217$ GPa, $\nu = 0.23$ [109], $\gamma = 0.1$ mJ m⁻² [110], $b_1 \approx 0.154$ nm и $b_2 \approx 0.024$ nm [110]. Результаты показаны на Рис. 2.7а для Al и Рис. 2.7б для 3C-SiC при длине трещины $L = 3d$ (кривые 1), $10d$ (кривые 2) и $20d$ (кривые 3), где d – размер зерна, который брался равным 30 nm. Видно, что во всех случаях на

начальной стадии образования двойника наблюдается рост критического напряжения τ_c (первая стадия локального упрочнения). Достигнув некоторого уровня τ_{sat} , кривая $\tau_c(n)$ выходит на насыщение и до определенного момента не зависит от числа n испущенных частичных b -дислокаций (стадия локального течения за счет утолщения двойниковой пластины). Наконец, для испускания частичной дислокации с номером, превышающим некоторое критическое число n_c , снова требуется повышение критического напряжения (вторая стадия локального упрочнения). Из представленных на Рис. 2.7 зависимостей также видно, что как для Al, так и для 3C-SiC увеличение длины трещины L ведет к значительному снижению критического напряжения.

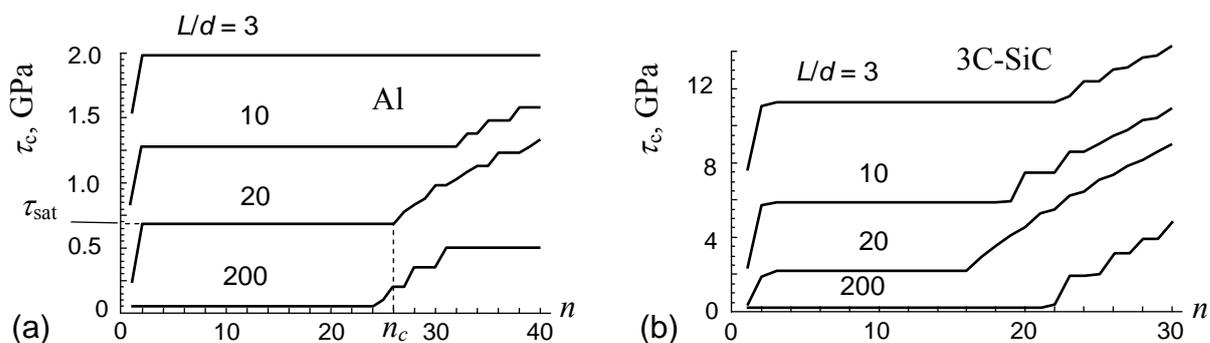


Рис. 2.7 Зависимость критического напряжения τ_c эмиссии двойникующей дислокации от ее порядкового номера n в нанокристаллических Al (a) и 3C-SiC (b) при различных значениях длины трещины: $L = 3d$ (кривые 1), $10d$ (кривые 2) и $20d$ (кривые 3)

На Рис. 2.8 приведены результаты численного расчета зависимостей положений устойчивого равновесия p_{eq} от номера n испущенных частичных b -дислокаций для Al (Рис. 2.8a) и 3C-SiC (Рис. 2.8b) при различных значениях при различных значениях длины L трещины. По сути дела, эти зависимости показывают конфигурацию фронта деформационного двойника. В обоих случаях двойниковая пластина имеет конечную толщину, определяемую критическим числом n_c .

Как видно из Рис. 2.8, можно выделить две конфигурации фронта деформационного двойника. При больших значениях длины трещины ($L = 20d$) большинство частичных дислокаций, образующих двойник, пересекает зерно, что придает продольному сечению двойниковой пластины приблизительно прямоугольную форму (Рис. 2.8). При малых значениях длины трещины ($L = 3d, 10d$) частичные дислокации более равномерно распределяются в зерне, что приводит к явной трапецевидной и даже к клиновидной форме двойника (Рис. 2.8).

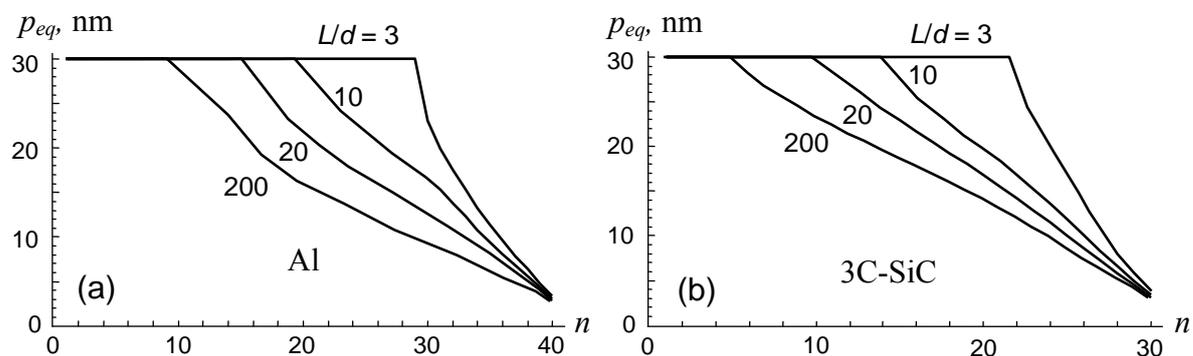


Рис. 2.8 Зависимость равновесного положения p_{eq} двойнивающей дислокации от ее порядкового номера n в нанокристаллических Al (a) и 3C-SiC (b) при различных значениях длины трещины: $L = 3d$, $10d$ и $20d$.

Тот факт, что уменьшение длины трещины L приводит к утолщению двойниковой пластины, объясняется просто: при этом резко растет критическое напряжение $\tau_c \approx \tau_{sat}$ (Рис. 2.7), которое нужно приложить, чтобы обеспечить устойчивое утолщение двойниковой пластины за счет эмиссии двойнивающих дислокаций. Естественно, что при таком высоком постоянном напряжении эти дислокации проходят по зерну дальше, чем при низких напряжениях, соответствующих бóльшим L . Соответственно, и двойниковая пластина становится при этом относительно толще. Оценки толщины двойниковой пластины дают примерно 3-10nm для Al и 3-6nm для 3C-SiC, что хорошо согласуется с данными просвечивающей электронной микроскопии.

2.1.3 Резюме

Разработаны теоретические модели, описывающие зарождение деформационных двойников на границах зерен в НКМ под действием внешнего напряжения и поля напряжений диполя зернограничных клиновых дисклинаций, и внешнего приложенного напряжения сконцентрированного трещиной. Показано, что если мощность ω зернограничных дисклинаций или длина трещины L достаточно велики, то для зарождения деформационного двойника не требуется преодоления энергетического барьера. При этом значения ω и L остаются в рамках величин, типичных для НКМ. Например, критическое внешнее напряжение, необходимое для зарождения первой двойнивающей дислокации, составляет (при $\omega = 0.5$) примерно 0.1 GPa для Cu и 0.3 GPa для Al. По мере роста толщины двойниковой пластины критическое напряжение эмиссии новых двойнивающих дислокаций сначала растет, затем достигает насыщения, а потом снова растет. Таким образом, наблюдаются две стадии локального упрочнения и промежуточная стадия локального течения нанокристаллического металла в масштабе одного нанозерна. 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. В зависимости от ориентации плеча дисклинационного диполя и длины трещины, продольное сечение этой пластины близко по форме к прямоугольнику или к затупленному клину, что хорошо согласуется с известными из литературы результатами экспериментальных наблюдений. Сделанные теоретические оценки толщины двойниковой пластины так же соответствуют эксперименту.

2.2 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 теоретических работах [141,142] 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 работах [141,142] 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 настоящей работы является исследование зарождения деформационного нанодвойника, за счет идеальных сдвигов в наноскопической области вблизи вершины микротрещины, на трещиностойкость нанокристаллических материалов.

2.2.1 Модель образования нанодвойника за счет идеальных сдвигов вблизи вершины трещины

Рассмотрим 2-мерную модель нанокристаллического образца, представляющего собой упругоизотропное тело (характеризуемое модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν), которое состоит из разделенных границами наноскопических зерен со средним размером d . Пусть в этом материале под действием внешнего растягивающего напряжения σ_0 развивается плоская трещина нормального отрыва (перпендикулярная направлению действия растягивающей нагрузки) длиной l .

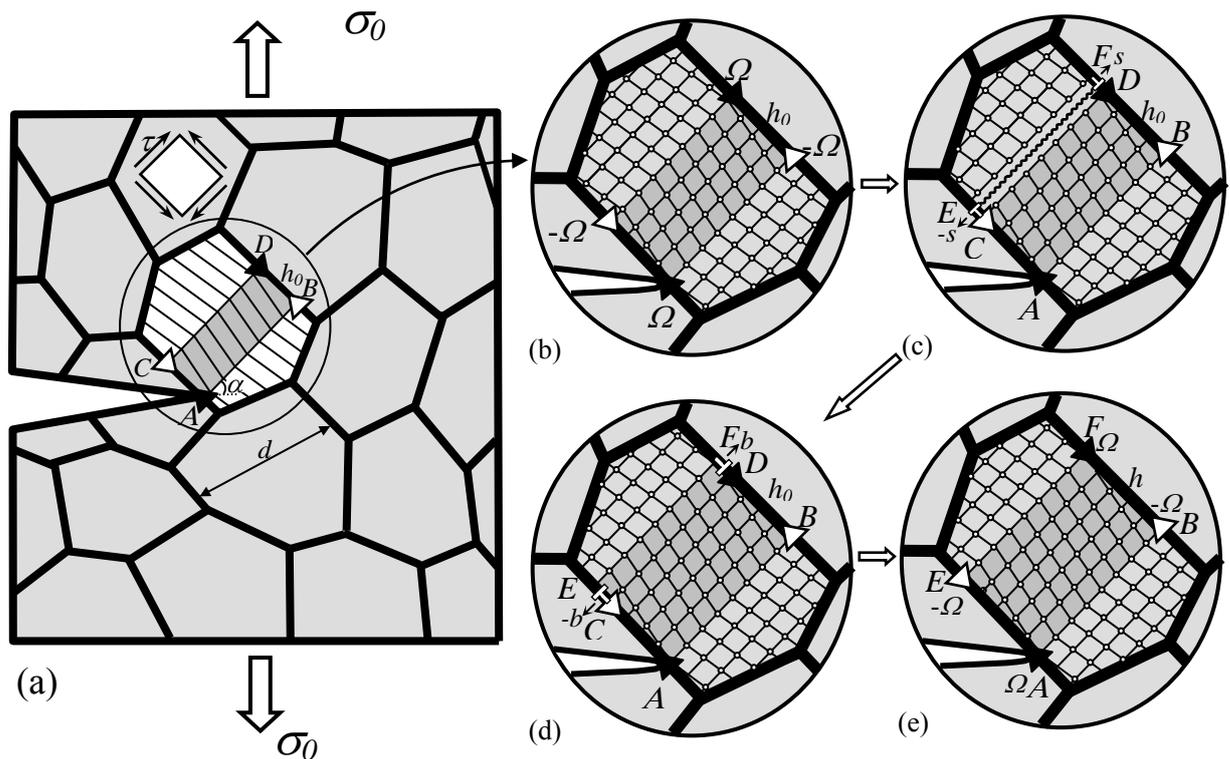


Рис. 2.9 Рост нанодвойника в деформируемом нанокристаллическом материале вблизи вершины трещины (2-мерная модель). (a) Модель нанокристаллического материала с плоской трещиной и прямоугольным нанодвойником $ABCD$, поле напряжений которого моделируется квадруполем клиновых $\pm\Omega$ -дислокаций. (b) Атомная структура зерна с нанодвойником $ABCD$ в его исходном состоянии. (c) Зарождение диполя частичных $\pm s$ -дислокаций EF вдоль кристаллографической плоскости, примыкающей к границе CD нанодвойника $ABCD$. (d) Рост векторов Бюргера частичных $\pm s$ -дислокаций диполя EF до величины векторов Бюргера $\pm b$ -дислокаций Шокли. (e) Увеличение длины нанодвойника $ABCD$ и образование нового нанодвойника $ABEF$.

Схематическое изображение 2-мерного сечения такого нанокристаллического образца представлено на Рис. 2.9. Для простоты мы

предполагаем, что структура материала не меняется вдоль оси z , которая перпендикулярна плоскости рисунка, сводя задачу к рассмотрению 2-мерной структуры. В рамках нашей модели 2-мерный случай позволяет описать все ключевые моменты зарождения деформационного нанодвойника.

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. 2.9a,b). Согласно подходу, разработанному в статье [141], 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. 2.9. 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. Такие дислокационные диполи с постепенно увеличивающимся модулем вектора Бюргерса называются нановозмущениями [143,144]. Их 3-мерные аналоги экспериментально наблюдались в деформируемых Гам-металлах (Gum metals) [145], микроколоннах [146] и нанопроволоках [147] (см. также теоретические работы [141,148,149]). Поле напряжений, создаваемых нанодвойником $ABCD$ (Рис. 2.9a), сформировавшимся в результате n идеальных наноскопических сдвигов, согласно работе [141], может быть эффективно описано полем напряжения дисклинационного квадруполь с мощностью дисклинаций $\pm\Omega$ ($\pm\Omega$ -дисклинациями) (Рис. 2.9b). Согласно теории дисклинаций [102], мощность Ω связана с модулем вектора Бюргерса b дислокации Шокли отношением $\Omega = 2 \arctan(b/(2p))$, где

p расстояние между соседними диполями $\pm b$ -дислокаций Шокли. Предполагается, что нанодвойник $ABCD$ имеет форму прямоугольника со сторонами d и h_0 (Рис. 2.9а,b), которые также являются плечами квадрупольного $\pm \Omega$ -дисклинации. Расстояние p между соседними диполями $\pm s$ -дислокаций равно расстоянию между плоскостями скольжения $\{111\}$ и связано с параметром решетки a следующим отношением: $p = a/\sqrt{3}$. В рамках модели дислокации Шокли представляют собой чисто краевые дислокации типа $(a/6)\langle 11\bar{2} \rangle$, с модулем вектора Бюргерса b равным $b = a/\sqrt{6}$.

В настоящей работе мы исследуем условия зарождения $(n+1)$ -го диполя дислокаций Шокли EF (путем зарождения и развития нановозмущения), который примыкает к нанодвойнику $ABCD$, ранее образовавшемуся вблизи вершины трещины в деформируемом нанокристаллическом материале (Рис. 2.9с). Как и ранее, в рамках нашей модели 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. 2.9с,d). Этот процесс сопровождается соответствующим изменением обобщенного дефекта упаковки, который соединяет дислокации диполя. В результате этого процесса толщина h_0 нанодвойника $ABCD$ увеличивается на расстояние p (между ближайшими плоскостями скольжения $\{111\}$), что приводит к образованию нового нанодвойника $ABEF$, характеризуемого толщиной $h = h_0 + p$ (Рис. 2.9е). 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. В следующем разделе для оценки условий энергетически выгодного роста нанодвойника рассмотрим энергетические характеристики зарождения и развития $(n+1)$ -

ого нановозмущения (диполя EF частичных $\pm s$ -дислокаций), примыкающего к ранее образовавшемуся нанодвойнику $ABCD$ (Рис. 2.9с-е).

Зарождение $(n + 1)$ -ого диполя EF частичных $\pm s$ -дислокаций (Рис. 2.9с-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 $\Delta W < 0$. Изменение энергии ΔW представимо в виде

$$\Delta W = E^s + E^{s-q} + E^{s-\sigma} + E_\gamma, \quad (2.25)$$

где E^s – собственная энергия диполя частичных $\pm s$ -дислокаций; E^{s-q} – энергия взаимодействия между диполем EF частичных $\pm s$ -дислокаций и квадруполем $ABCD$ $\pm \Omega$ -дисклинаций; $E^{s-\sigma}$ – энергия взаимодействия диполя EF частичных $\pm s$ -дислокаций с полем напряжений σ_{ij}^c , созданным в теле с трещиной внешней нагрузкой σ_0 , E_γ – энергия обобщенного дефекта упаковки, который соединяет между собой противоположные дислокации в $(n+1)$ -ом диполе EF частичных $\pm s$ -дислокаций.

В первом приближении мы пренебрежем влиянием трещины на энергию E^s и для расчета этой энергии воспользуемся выражением [91] для энергии дислокационного диполя в бесконечном изотропном теле:

$$E_s = Ds^2 \left(\ln \frac{d}{r_c} + 1 \right), \quad (2.26)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, $r_c \approx s$ – радиус обрезания поля напряжений ядра частичных $\pm s$ -дислокаций.

Расчет энергии упругого взаимодействия квадруполя стыковых $\pm \Omega$ -дисклинаций с диполем частичных $\pm s$ -дислокаций проводился стандартным образом, путем зарождения дислокационного диполя в поле сдвиговых напряжений дисклинационного квадруполя (для примера см. [102,108]). Как и при расчете энергии E^s дислокационного диполя, пренебрежем влиянием

трещины на энергию E^{s-q} . Окончательное выражение для энергии E^{s-q} имеет следующий вид:

$$E^{s-q} = D\Omega b \left(h \ln \frac{d^2 + h^2}{h^2} - p \ln \frac{d^2 + p^2}{p^2} \right). \quad (2.27)$$

Энергия $E^{s-\sigma}$ записывается в виде [102]:

$$E^{s-\sigma} = -b \int_0^d \sigma_{xy}^c dx, \quad (2.28)$$

где σ_{xy}^c – компонента поля напряжений σ_{ij}^c (см. Приложение А), созданного в теле с плоской трещиной конечной длины l приложенной нагрузкой σ_0 .

Энергия E_γ обобщенного дефекта упаковки, соединяющего противоположные дислокации в n диполях $\pm s$ -дислокаций [151,152], определяется выражением

$$E_\gamma = \gamma_n(s)d, \quad (2.29)$$

где

$$\gamma_n(s) = (\gamma_{ut} - 2\gamma_{tsf}) \sin^2(\pi s/b), \quad n \geq 3, \quad (2.30)$$

$$\gamma_1(s) = \begin{cases} \gamma_{us} \sin^2(\pi s/b), & 0 \leq s/b \leq 1/2, \\ \gamma_{isf} + (\gamma_{us} - \gamma_{isf}) \sin^2(\pi s/b), & 1/2 < s/b \leq 1, \end{cases} \quad (2.31)$$

$$\gamma_2(s) = \begin{cases} (\gamma_{ut} - \gamma_{isf}) \sin^2(\pi s/b), & 0 \leq s/b \leq 1/2, \\ (\gamma_{ut} - 2\gamma_{tsf}) \sin^2(\pi s/b), & 1/2 < s/b \leq 1, \end{cases} \quad (2.32)$$

где γ_{ut} , γ_{tsf} , γ_{us} и γ_{isf} – параметры материала.

Формулы (2.25)–(2.32) позволяют рассчитать разности энергий ΔW . Для случая нанокристаллического Ni построим зависимость разности энергий ΔW от безразмерной величины вектора Бюргерса дислокаций s/b . Для Ni будем использовать следующие значения параметров: $G = 73$ ГПа,

$\nu = 0.34$, $a = 352$ нм [91], $\gamma_{ut} = 0.324$ Дж/м², $\gamma_{tsf} = 0.055$ Дж/м², $\gamma_{us} = 0.273$ Дж/м² и $\gamma_{isf} = 0.110$ Дж/м² [151]. Зависимости $\Delta W(s/b)$ представлены на Рис. 2.10 для случая $d = 30$ нм, $l = 150$ нм, $n = 15$, $\alpha = 70^\circ$ при различных значениях внешнего сдвигового напряжения τ . Следует отметить, что в рамках модели внешнее сдвиговое напряжение τ определяется как сдвиговое напряжение, создаваемое внешним растягивающим напряжением σ_0 в плоскости трещины при отсутствии трещины, и дается выражением $\tau = \sigma_0 \sin \alpha \cos \alpha$.

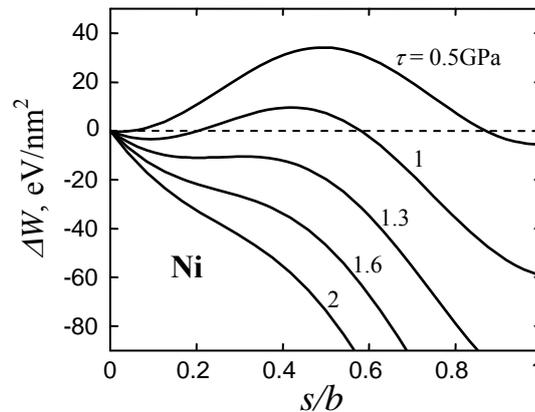


Рис. 2.10 Зависимость разности энергий ΔW , характеризующей зарождение диполя частичных $\pm s$ -дислокаций, от отношения s/b модулей векторов Бюргера при различных значениях приложенного сдвигового напряжения $\tau = 0.5, 1, 1.3, 1.6$ и 2 ГПа.

Как следует из Рис. 2.10, при $\tau = 0.5, 1$ или 1.3 ГПа разность 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 (см. кривые, соответствующие $\tau = 1.6$ или 2 ГПа на Рис. 2.10) 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.

2.2.2. Влияние образования нанодвойника вблизи вершины трещины на трещиностойкость нанокристаллического материала

Изучим влияние квадруполя $\pm\Omega$ -дисклинаций, который появился в результате зарождения деформационного нанодвойника вблизи вершины трещины, на трещиностойкость нанокристаллического материала. Для этого рассмотрим отдельный нанодвойник $ABEF$ (Рис. 2.9е), который образовался вблизи вершины плоской трещины нормального отрыва в деформируемом нанокристаллическом материале. Зарождение нанодвойника $ABEF$ сопровождается образованием квадруполя $\pm\Omega$ -дисклинаций, поля напряжений которых оказывают влияние на рост трещины. Для анализа влияния дисклинационного квадруполя на развитие трещины воспользуемся энергетическим критерием роста трещины. В рассматриваемом нами случае плоского напряженного состояния этот критерий имеет вид [153]:

$$\frac{1-\nu}{2G}(K_I^2 + K_{II}^2) = 2\gamma_e, \quad (2.33)$$

где K_I и K_{II} – коэффициенты интенсивности нормальных и сдвиговых напряжений соответственно; $\gamma_e = \gamma$ (где γ – удельная поверхностная энергия) для трещины, которая распространяется внутри зерна, и $\gamma_e = \gamma - \gamma_b/2$ (где γ_b – удельная энергия границы зерна) для трещины, которая растет вдоль границы зерна. В рассматриваемом нами случае (Рис. 2.9), внешняя нагрузка σ_0 действует в направлении, перпендикулярном направлению роста трещины. В этом случае коэффициенты интенсивности K_I и K_{II} выражаются следующими формулами:

$$K_I = K_I^\sigma + k_I^q, \quad K_{II} = k_{II}^q, \quad (2.34)$$

где K_I^σ – коэффициент интенсивности напряжений, созданных внешней нагрузкой σ_0 , а k_I^q и k_{II}^q – коэффициенты интенсивности напряжений, созданных квадруполем $\pm\Omega$ -дисклинаций (Рис. 2.9е).

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 [150]:

$$K_I^\sigma = K_{IC}. \quad (2.35)$$

Подставляя (2.34) в (2.33) и учитывая равенство (2.35) получаем выражение для расчета K_{IC} [154]:

$$K_{IC} = \sqrt{(K_{IC}^\sigma)^2 - (k_{II}^q)^2} - k_{IC}^q, \quad (2.36)$$

где $k_{IC}^q = k_I^q \Big|_{K_I^\sigma = K_{IC}}$, $k_{II}^q = k_{II}^q \Big|_{K_I^\sigma = K_{IC}}$ 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.

Для анализа влияния зарождения нанодвойника $ABEF$ вблизи вершины трещины на дальнейший рост этой трещины необходимо сравнить значения критических коэффициентов интенсивности напряжений K_{IC} и K_{IC}^σ . Условие $K_{IC} > K_{IC}^\sigma$ означает, что вязкость разрушения растет, и, следовательно, образование нанодвойника $ABEF$ повышает трещиностойкость материала. При $K_{IC} < K_{IC}^\sigma$ трещиностойкость материала снижается.

Рассчитаем величину K_{IC} в случае, представленном на Рис. 2.9е, когда у вершины трещины зарождается квадруполь $\pm\Omega$ -дисклинаций. При расчете будем считать, что плечи h и d квадруполя дисклинаций малы по сравнению с длиной трещины l ($h, d \ll l$), что позволяет нам при расчете коэффициентов k_I^q и k_{II}^q воспользоваться приближением полубесконечной трещины. В случае полубесконечной трещины дисклинация, находящаяся в вершине трещины в точке A , выходит на свободную поверхность и исчезает,

что превращает дисклинационный квадруполь в три отдельные дисклинации. Для конфигурации (Рис. 2.9е) коэффициенты интенсивности напряжений k_I^q и k_{II}^q рассчитываются с помощью выражений [154]:

$$\begin{aligned} k_I^q &= G\omega\sqrt{d} f_1(\alpha, t) / (2\sqrt{2\pi}(1-\nu)), \\ k_{II}^q &= G\omega\sqrt{d} f_2(\alpha, t) / (2\sqrt{2\pi}(1-\nu)), \\ f_1(\alpha, t) &= \sum_{k=1}^3 (-1)^k \sqrt{\tilde{r}_k} [3\cos(\theta_k/2) + \cos(3\theta_k/2)], \\ f_2(\alpha, t) &= \sum_{k=1}^3 (-1)^k \sqrt{\tilde{r}_k} [\sin(\theta_k/2) + \sin(3\theta_k/2)], \end{aligned} \quad (2.37)$$

где $t = h/d$, $\tilde{r}_1 = 1$, $\tilde{r}_2 = \sqrt{t^2 + 1}$, $\tilde{r}_3 = t$, $\theta_1 = \alpha$,

$$\theta_2 = \alpha - \pi/2 + \text{arc cott} + 2\pi\Xi(-\alpha - \pi/2 - \text{arc cott}),$$

$\theta_3 = \alpha - \pi/2 + \text{arc cott} + 2\pi\Xi(-\alpha - \pi/2)$, $\Xi(x)$ – функция Хэвисайда, которая равна 1 при $x \geq 0$ и нулю при $x < 0$.

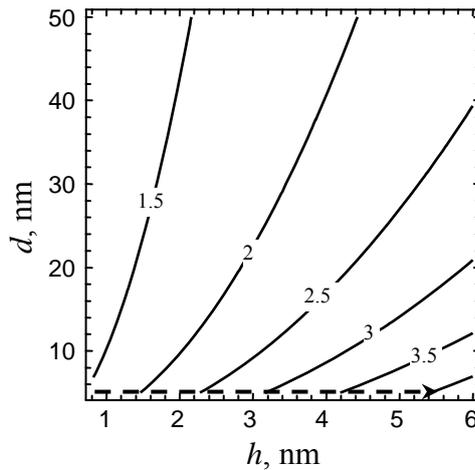


Рис. 2.11 Карта безразмерного критического значения K_{IC}/K_{IC}^σ коэффициента интенсивности напряжений в координатах (d, h_{eq}) .

С помощью формул (2.36) и (2.37) рассчитаем отношение K_{IC}/K_{IC}^σ критических значений коэффициентов интенсивности напряжений. Зарождение нанодвойника $ABEF$ (приводящее к образованию квадруполя $\pm \Omega$ -дисклинаций) 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. 2.11 для случая внутривершинной трещины в нанокристаллическом Ni при $\gamma = 1725$ Дж/м² [91] и $\alpha = 70^{\circ}$. Пунктирная линия на Рис. 2.11 описывает формоизменение нанодвойника $ABEF$, которое соответствует наибольшему возможному значению отношения K_{IC} / K_{IC}^{σ} . Другими словами, такое формоизменение нанодвойника локально максимально повышает трещиностойкость материала.

2.2.3 Резюме

Таким образом, зарождение и эволюция деформационных нанодвойников вблизи вершин трещин в деформируемых нанокристаллических материалах может эффективно реализовываться за счет идеальных наноскопических сдвигов (Рис. 2.9). В настоящей работе показано, что рост нанодвойника за счет идеальных наноскопических сдвигов является энергетически выгодным процессом вблизи вершин трещин в деформируемом нанокристаллическом Ni в широком диапазоне параметров внутренней структуры материала при значениях локального сдвигового напряжения τ , превышающих 1.4 ГПа. Зарождение таких нанодвойников и связанной с ними дисклинационной структуры вблизи вершин трещин снижает высокие локальные напряжения, действующие около этих вершин. Наши вычисления показали, что трещиностойкость нанокристаллического материала увеличивается с уменьшением размера зерна d и/или увеличением толщины нанодвойника h (Рис. 2.11). Таким образом, зарождение и эволюция нанодвойников увеличивает вязкость разрушения хрупких нанокристаллических материалов и, как следствие, может служить эффективным механизмом повышения трещиностойкости таких наноматериалов.

Приложение А

Рассмотрим нанокристаллический материал, находящийся под действием внешней растягивающей нагрузки σ (Рис. 2.6). Пусть под действием этого напряжения образуется трещина одновременно плоского сдвига и нормального разрыва длины L (Рис. 2.6).

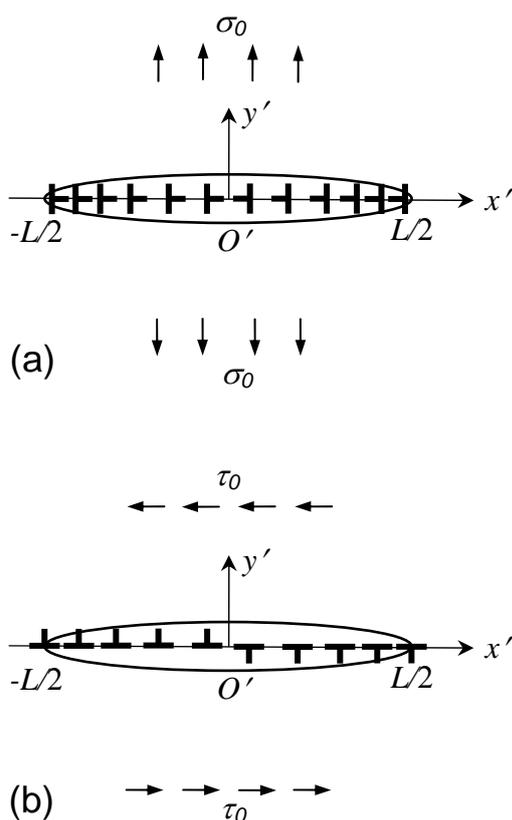


Рис. А1 Дислокационная модель плоской трещины нормального отрыва (а) и трещины плоского сдвига (b).

Рассмотрим отдельно случаи образования трещины разрыва и сдвиговой трещины. Сначала исследуем случай образования трещины разрыва, дислокационная модель которой представлена на Рис. А1а в системе координат $O'x'y'$ [91]. При заданной на Рис. 2.6 ориентации трещины, трещина разрыва образуется под действием внешнего напряжения $\sigma_0 = \sigma \sin^2 \alpha$. В модели принимается $\alpha = \pi/4$, тогда $\sigma_0 = \sigma/2$. В этом случае суммарное напряжение, действующие в материале с трещиной разрыва в системе координат $O'x'y'$, представимо в виде [91]:

$$\sigma_{ij}^n(x', y') = \int_{-L/2}^{L/2} \rho(x'') \sigma_{ij}^{by}(x' - x'', y') dx'' + \sigma_0 \delta_{iy} \delta_{jy}, \quad (1a)$$

где $\sigma_{ij}^{by}(x' - x'', y')$ - поле напряжений дислокации с вектором Бюргерса $b e_{y'}$, расположенной на линии $(x' = x'', y' = 0)$, $\rho(x'')$ - линейная плотность таких дислокаций, δ_{ij} - символ Кронекера.

Выражение для $\rho(x'')$ имеет вид [89]:

$$\rho(x') = -\frac{1}{Db\pi^2 \sqrt{L^2/4 - x'^2}} \left[\int_{-L/2}^{L/2} \frac{\sigma_0(x'') \sqrt{L^2/4 - x''^2}}{x'' - x'} dx'' + C \right], \quad (2a)$$

где $C = \pi \int_{-L/2}^{L/2} \rho(x') dx'$. В нашем случае $\sigma_0(x'') = const = \sigma_0$ формула (2a) принимает

вид

$$\rho(x') = \frac{\sigma_0(x' + L/2)}{Db\pi \sqrt{L^2/4 - (x' + L/2)^2}}. \quad (3a)$$

Величины $\sigma_{ij}^{by}(x', y')$ рассчитываются по формулам [91]

$$\begin{aligned} \sigma_{x'x'}^{by} &= Db \frac{(x' + L/2)[(x' + L/2)^2 - y'^2]}{[(x' + L/2)^2 + y'^2]^2}, & \sigma_{y'y'}^{by} &= Db \frac{(x' + L/2)[(x' + L/2)^2 + 3y'^2]}{[(x' + L/2)^2 + y'^2]^2}, \\ \sigma_{x'y'}^{by} &= Db \frac{y'[(x' + L/2)^2 - y'^2]}{[(x' + L/2)^2 + y'^2]^2}, & \sigma_{z'z'}^{by} &= \nu(\sigma_{x'x'}^{by} + \sigma_{y'y'}^{by}). \end{aligned} \quad (4a)$$

Используя формулы (1a-4a) запишем в системе координат $O'x'y'$ (Рис. А1а) выражения для компонент суммарного поля напряжений, действующего в материале с трещиной разрыва. После ряда вычислений получаем следующие формулы:

$$\begin{aligned} \sigma_{x'x'}^n &= \frac{\sigma_0}{2\sqrt{2}P^6} \left\{ P^2(x'^2 + y'^2 - 1)(|y'|Q_- - |x'|Q_+) \right. \\ &\quad - |x'|Q_+[y'^4 - 2(x'^2 + L^2/4)y'^2 - 3(x'^2 - L^2/4)^2] \\ &\quad \left. + |y'|Q_-[y'^4 + 6(x'^2 + L^2/4)y'^2 + 5(x'^2 - L^2/4)^2] \right\}, \\ \sigma_{y'y'}^n &= \frac{\sigma_0}{2\sqrt{2}P^6} \left\{ P^2(x'^2 + y'^2 - 1)(|x'|Q_+ - |y'|Q_-) \right. \\ &\quad + |x'|Q_+[5y'^4 + 6(x'^2 + L^2/4)y'^2 + (x'^2 - L^2/4)^2] \\ &\quad \left. + |y'|Q_-[3y'^4 + 2(x'^2 + L^2/4)y'^2 - (x'^2 - L^2/4)^2] \right\}, \end{aligned} \quad (5a)$$

$$\sigma_{x'y'}^n = \frac{\sigma_0 \operatorname{sign}(x'y')}{2\sqrt{2}P^6} \left\{ P^2(x'^2 + y'^2 - 1)(|x'|Q_- + |y'|Q_+) \right. \\ \left. - |x'|Q_- [3y'^4 + 2(x'^2 + L^2/4)y'^2 - (x'^2 - L^2/4)^2] \right. \\ \left. + |y'|Q_+ [y'^4 - 2(x'^2 + L^2/4)y'^2 - 3(x'^2 - L^2/4)^2] \right\},$$

где $P^2 = [(x'^2 - y'^2 - L^2/4)^2 + 4x'^2y'^2]^{1/2}$ и $Q_{\pm} = [P^2 \pm (x'^2 - y'^2 - L^2/4)]^{1/2}$.

Полученные компоненты σ_{ij}^n поля напряжений удовлетворяют уравнениям равновесия и граничным условиям на берегах разреза трещины.

Компоненты σ_{ij}^n в системе координат Oxy (Рис. 2.6) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^n &= \sigma_{y'y'}^n(x' \rightarrow -y + L/2, y' \rightarrow x + d), \\ \sigma_{yy}^n &= \sigma_{x'x'}^n(x' \rightarrow -y + L/2, y' \rightarrow x + d), \\ \sigma_{xy}^n &= -\sigma_{x'y'}^n(x' \rightarrow -y + L/2, y' \rightarrow x + d). \end{aligned} \quad (6a)$$

Аналогичным образом можно рассмотреть случай образования сдвиговой трещины, дислокационная модель которой представлена на Рис. A1b. При заданной на Рис. 2.6 ориентации трещины, трещина плоского сдвига образуется под действием внешнего напряжения $\tau_0 = (\sigma/2)\sin 2\alpha$ (при $\alpha = \pi/4$ $\tau_0 = \sigma/2$). В этом случае, используя схему расчета аналогичную приведенной для трещины разрыва, получаем следующие выражения для компонент σ_{ij}^s суммарного поля напряжений, действующего в материале с трещиной плоского сдвига:

$$\begin{aligned} \sigma_{x'x'}^s &= \frac{\tau_0 \operatorname{sign}(x'y')}{2\sqrt{2}P^6} \left\{ P^2(x'^2 + y'^2 - 1)(|x'|Q_- + |y'|Q_+) \right. \\ &\quad + |x'|Q_- [y'^4 + 6(x'^2 + L^2/4)y'^2 + 5(x'^2 - L^2/4)^2] \\ &\quad \left. - |y'|Q_+ [3y'^4 + 10(x'^2 + L^2/4)y'^2 + 7(x'^2 - L^2/4)^2] \right\} - \tau_0, \\ \sigma_{y'y'}^s &= -\frac{\tau_0 \operatorname{sign}(x'y')}{2\sqrt{2}P^6} \left\{ P^2(x'^2 + y'^2 - 1)(|x'|Q_- + |y'|Q_+) \right. \\ &\quad - |x'|Q_- [3y'^4 + 2(x'^2 + L^2/4)y'^2 - (x'^2 - L^2/4)^2] \\ &\quad \left. + |y'|Q_+ [y'^4 - 2(x'^2 + L^2/4)y'^2 - 3(x'^2 - L^2/4)^2] \right\}, \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\sigma_{x'y'}^s = -\frac{\tau_0}{2\sqrt{2}P^6} \left\{ P^2(x'^2 + y'^2 - 1)(|y'|Q_- - |x'|Q_+) \right. \\ \left. - |x'|Q_+[y'^4 - 2(x'^2 + L^2/4)y'^2 - 3(x'^2 - L^2/4)^2] \right. \\ \left. + |y'|Q_-[y'^4 + 6(x'^2 + L^2/4)y'^2 + 5(x'^2 - L^2/4)^2] \right\},$$

Компоненты σ_{ij}^s поля напряжений также удовлетворяют уравнениям равновесия и граничным условиям на берегах разреза трещины.

В системе координат Oxy (Рис. 2.6) поля напряжений σ_{ij}^s представимы в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^s &= \sigma_{y'y'}^s(x' \rightarrow -y + L/2, y' \rightarrow x + d), \\ \sigma_{yy}^s &= \sigma_{x'x'}^s(x' \rightarrow -y + L/2, y' \rightarrow x + d), \\ \sigma_{xy}^s &= -\sigma_{x'y'}^s(x' \rightarrow -y + L/2, y' \rightarrow x + d). \end{aligned} \quad (8a)$$

ГЛАВА 3

ЗЕРНОГРАНИЧНЫЕ МОДЫ НАНОМАСШТАБНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ

Твердотельные пленки и покрытия представляют собой предмет интенсивных экспериментальных и теоретических исследований фундаментального характера (например, [155-172]), что мотивируется их широким применением в современных высоких технологиях. Стабильность физических свойств пленок и покрытий, имеющая первостепенную важность для их технологического использования, существенно зависит от присутствия в них дефектов и полей напряжений. Так, возникающее в силу структурных и других факторов различие между параметрами кристаллических решеток в кристаллической структуре материалов подложек и пленок (покрытий) обуславливает возникновение в пленках (покрытиях) внутренних напряжений – напряжений несоответствия, которые существенно влияют на эволюцию структуры и функциональных свойства пленок (покрытий) [170-172]. Основным механизмом релаксации напряжений несоответствия в монокристаллических и поликристаллических пленках является образование ансамблей дислокаций несоответствия на границе раздела пленки с подложкой [170-172]. В последние годы особое внимание уделяется изучению структуры и свойств нанокристаллических пленок и покрытий [160-164]. При этом отмечается, что уровень напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках (покрытиях) существенно ниже по сравнению с таковым в обычных монокристаллических и поликристаллических пленках (покрытиях) [163,164]. 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.

Основной целью этой главы является построение теоретических моделей, которые описывают новые микромеханизмы релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. При написании Главы 3 использовались материалы, опубликованные автором в соавторстве в работах [1а,14а,15а,19а,22а,31а].

3.1 Диполи дисклинаций несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях

В этом разделе будет предложена теоретическая модель, описывающая особый микромеханизм релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Согласно представлениям предлагаемой модели, в нанокристаллических пленках и покрытиях при определенных условиях реализуется межзеренное скольжение, которое сопровождается образованием ансамбля диполей дисклинаций (ротационных дефектов). Такие диполи создают поля упругих напряжений, которые частично компенсируют напряжения несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях.

3.1.1 Модель образования дисклинационных диполей в системе пленка/подложка

Рассмотрим систему пленка–подложка, которая состоит из нанокристаллической пленки толщиной H и полубесконечной кристаллической подложки. Вследствие различия между параметрами кристаллических решеток подложки и пленки в пленке присутствуют напряжения несоответствия. В рамках предлагаемой модели в пленке происходит межзеренное скольжение, что, согласно [165,166], приводит к образованию диполей клиновых дисклинаций (Рис. 3.1). Мощности ω

дисклинаций равны по модулю углам разориентировки границ наклона, перемещающихся при межзеренном скольжении, а плечи L диполей (расстояния между дисклинациями одного диполя) равны по модулю перемещениям соответствующих границ [165,166] (Рис. 3.1). Поля упругих напряжений диполей дисклинаций частично компенсируют напряжения несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях.

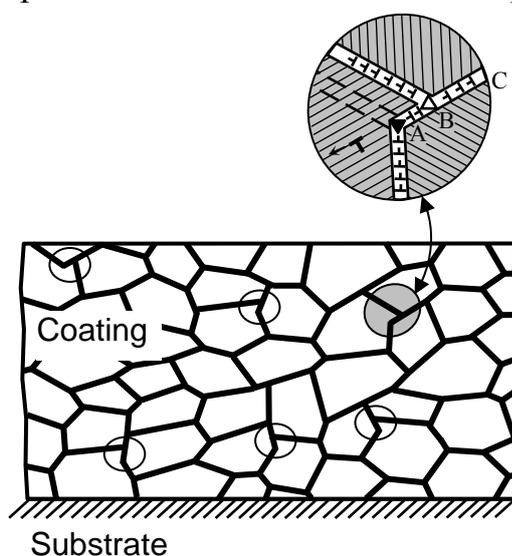


Рис. 3.1 Нанокристаллическая пленка на подложке. Межзеренное скольжение приводит к образованию диполей дисклинаций (треугольники).

Для теоретической оценки условий, при которых образование диполей клиновых дисклинаций в нанокристаллической пленке является энергетически выгодным, ниже мы рассмотрим модельную систему пленка–подложка (Рис. 3.2). В такой модельной системе в пленке зарождается бесконечный ряд одинаковых двуосных диполей клиновых дисклинаций, обладающих мощностью $\pm \omega$ и образующих периодическую структуру с периодом p (рис. 3.2).

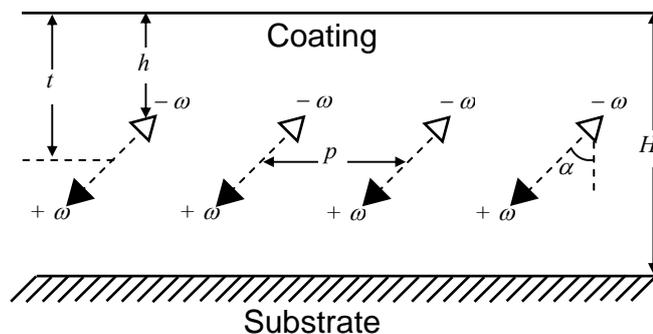


Рис. 3.2 Модель системы пленка–подложка с периодически распределенными диполями клиновых $\pm \omega$ -дисклинаций.

Расстояние от свободной поверхности до всех дисклинаций одного знака зафиксировано и равно h (в случае на Рис. 3.2 это отрицательные дисклинации $-\omega$). Положение дисклинаций противоположного знака определяется величиной плеча L дисклинационных диполей и углом α , который отсчитывается относительно нормали к поверхности подложки (см. Рис. 3.2). Предполагается, что пленка и подложка являются упругоизотропными и имеют одинаковые значения упругих модулей: модуля сдвига G и коэффициента Пуассона ν . 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. В общем случае поля внутренних напряжений в нанокристаллической пленке задаются многими факторами, в частности, ориентацией зерен относительно кристаллической решетки подложки, дилатационным параметром несоответствия f , различием коэффициентов термического расширения материалов пленки и подложки и др. Учет всех таких факторов представляется весьма трудоемкой отдельной задачей, которая выходит за рамки настоящей работы, посвященной теоретическому исследованию особого микромеханизма релаксации внутренних напряжений в нанокристаллических пленках и покрытиях (а не детальному описанию этих напряжений). Для целей настоящей работы мы воспользуемся приближенным описанием внутренних напряжений как напряжений несоответствия, задаваемых дилатационным параметром несоответствия f .

Отметим некоторое сходство предлагаемой модели с моделью [166]. Обе модели рассматривают конфигурации клиновых дисклинаций в качестве дефектных конфигураций, обеспечивающих частичную релаксацию напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Диполи и квадрупольные дисклинации зарождаются на тройных стыках границ зерен при межзеренном скольжении [165] и миграции границ зерен [166], соответственно. Поэтому именно нанокристаллическое состояние пленки

(покрытия), характеризующееся очень высокой плотностью тройных стыков границ зерен, обуславливает эффективное зарождение дисклинаций и действие их дипольных и квадрупольных конфигураций в качестве дефектов, обеспечивающих частичную релаксацию напряжений несоответствия. В обычных поликристаллических пленках плотность тройных стыков мала, что задает малую плотность дисклинационных конфигураций и их неэффективность при релаксации напряжений несоответствия. В монокристаллических пленках границы зерен и их тройные стыки отсутствуют вообще. Как следствие, дисклинационные конфигурации способны вносить существенный вклад в релаксацию напряжений несоответствия только в нанокристаллических пленках и покрытиях.

3.1.2 Энергетические характеристики зарождения дисклинационных диполей в системе пленка/подложка

Рассмотрим процесс образования отдельного диполя дисклинаций несоответствия в системе пленка/подложка. Зарождение такого дисклинационного диполя в исходно бездефектной пленке характеризуется следующей разностью энергий ΔW (на единицу длины дисклинации):

$$\Delta W = E_{self}^{\Delta} + E_{int}^{\Delta-f} \quad (3.1)$$

где E_{self}^{Δ} – собственная энергия дисклинационного диполя, а $E_{int}^{\Delta-f}$ – энергия взаимодействия дисклинационного диполя с полем несоответствия.

Собственная энергия E_{self}^{Δ} дисклинационного диполя (на единицу длины дисклинации) задается известной формулой [102]:

$$E_{self}^{\Delta} = \frac{D\omega^2 L^2}{2} \left(\cos^2 \alpha + \frac{1}{2} \ln \frac{L^2 \sin^2 \alpha + 4t^2}{L^2} \right), \quad (3.2)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, $t = h + (L/2) \cos \alpha$ – расстояние от свободной поверхности до центра дисклинационного диполя (Рис. 3.2). Энергия

взаимодействия дисклинационного диполя с полем напряжений несоответствия определяется формулой [166]:

$$E_{\text{int}}^{\Delta-f} = -4\pi D(1+\nu)f\omega L t \cos \alpha \quad (3.3)$$

Из (3.1)–(3.3) получаем следующее выражение для изменения энергии ΔW :

$$\Delta W = \frac{D\omega^2 L^2}{2} \left(\cos^2 \alpha + \frac{1}{2} \ln \frac{L^2 \sin^2 \alpha + 4t^2}{L^2} - \frac{8\pi(1+\nu)ft \cos \alpha}{\omega L} \right) \quad (3.4)$$

Зарождение отдельного дисклинационного диполя в пленке энергетически выгодно при $\Delta W < 0$. Как следует из формулы (3.4), необходимым (но не достаточным) условием энергетической выгоды зарождения дисклинационного диполя является условие $f\omega \cos \alpha > 0$. Последнее условие означает, что при $f\omega > 0$ дисклинационный диполь образуется только в случае, когда угол α находится в интервале: $-\pi/2 < \alpha < \pi/2$. Для $f\omega < 0$ дисклинационный диполь образуется только в случае, когда угол α находится в интервале: $\pi/2 < \alpha < 3\pi/2$.

Используя формулу (3.4), построим зависимости изменения энергии ΔW от плеча L дисклинационного диполя (которое равно величине перемещения тройного стыка при межзеренном скольжении [165,166]). Для расчетов положим, что $\alpha = 0^\circ$, $H = 30$ nm и $h = H/2$. Также будем использовать следующие значения параметров, которые характерны для систем пленка/подложка AlN/6H-SiC: $G = 131$ GPa, $\nu = 0.287$ [167], $f = 0.009$ [168] и систем пленка/подложка GaN/6H-SiC: $G = 67$ GPa, $\nu = 0.352$ [167], $f = -0.0357$ [168]. Указанные выше значения модулей упругости и коэффициента Пуассона относятся к материалам пленки. В модели не учитывается различие в упругих модулях пленки и подложки, поскольку рассматриваемая дефектная конфигурация формируется в пленке достаточно далеко от границы раздела между пленкой и подложкой.

На рис. 3.3 представлены зависимости $\Delta W(L)$ для различных значений мощности ω дисклинационного диполя. Как следует из Рис. 3.3, для системы

AlN/6H-SiC (рис. 3.3a) при $\omega = 20^\circ$ и 30° существует положение устойчивого равновесия дисклинаций, соответствующее минимуму ΔW , в то время как при $\omega = 5^\circ$ дисклинационному диполю энергетически выгодно неограниченно расширяться (увеличивать плечо диполя). Вместе с тем, в системе GaN/6H-SiC (рис. 3.3b) дисклинационному диполю энергетически выгодно расширяться (для $L < 5$ nm) как в случае $\omega = 5^\circ$, так и при $\omega = 20^\circ$ или 30° .

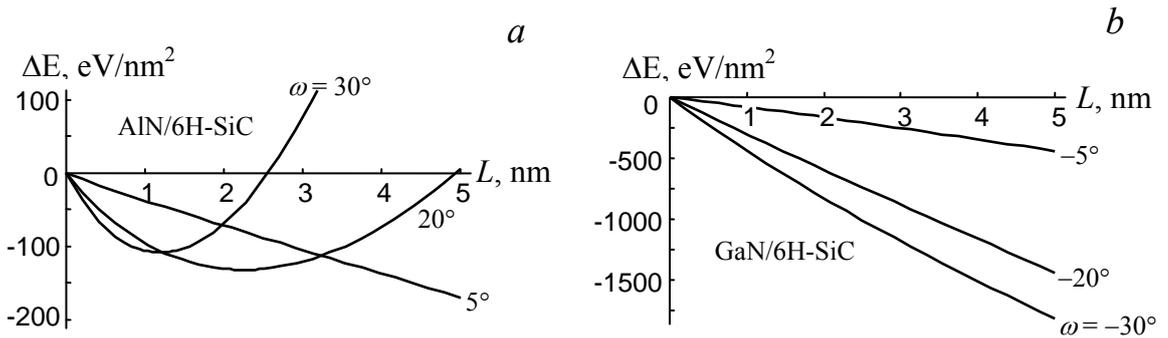


Рис. 3.3 Зависимости энергии ΔW , характеризующей образование отдельного дисклинационного диполя в пленке, от его плеча L при различных значениях мощности ω дисклинационного диполя в системах пленка–подложка AlN/6H-SiC (a) и GaN/6H-SiC (b).

Используя формулу (3.4), 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 $(\partial \Delta W / \partial L)|_{L=L_e} = 0$. Подстановка последнего соотношения в формулу (3.4) дает следующее уравнение для определения L_e :

$$\frac{L_e}{t_e \cos \alpha} \left(\ln \frac{L_e^2 \sin^2 \alpha + 4t_e^2}{L_e^2} + \frac{L_e^2 \sin^2 \alpha}{L_e^2 \sin^2 \alpha + 4t_e^2} + \cos 2\alpha \right) = q, \quad (3.5)$$

где $t_e = h + (L_e/2) \cos \alpha$, а $q = 8\pi(1+\nu)f/\omega$. Наряду с уравнением (3.5), 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.

Зависимости безразмерного равновесного плеча диполя L_e/h от параметра $|q|$ при различных значениях угла α приведены на рис. 3.4а и b для случаев $f\omega > 0$ и $f\omega < 0$ соответственно. Как следует из Рис. 3.4, равновесное плечо диполя L_e увеличивается с ростом $|q|$. Это означает, что L_e растет при увеличении абсолютной величины несоответствия $|f|$ и/или уменьшении абсолютной величины $|\omega|$ мощности дисклинаций.

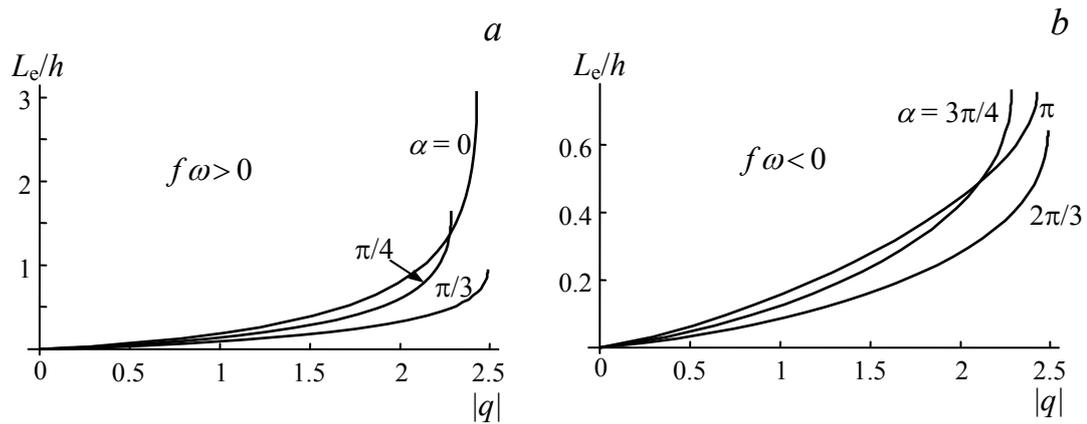


Рис. 3.4 Зависимости безразмерной равновесной длины L_e/h плеча дисклинационного диполя от параметра $|q|$ для $f\omega > 0$ (а) и $f\omega < 0$ (b).

Равновесное плечо L_e существует, если величина параметра $|q|$ меньше некоторого критического значения $q_c(\alpha)$, которое соответствует крайней правой точке на каждой из кривых на Рис. 3.4а и b. При $|q| > q_c(\alpha)$ уравнение (3.5) не имеет решений, и энергия ΔW уменьшается с ростом плеча L диполя при любом значении L . В этом случае дисклинационный диполь может расширяться неограниченно, по крайней мере, пока движущаяся при межзеренном скольжении дисклинация не приблизится к соседнему тройному стыку или не достигнет межфазной границы между пленкой и подложкой (или свободной поверхности пленки). Увеличение L также повышает вероятность зарождения трещины в окрестности дисклинационного диполя [165,166].

Используя определение параметра $|q|$, соотношение $|q| > q_c(\alpha)$, описывающее случай неограниченного расширения дисклинационного диполя, можно переписать в виде $|\omega| < \omega_c$, где $\omega_c = 8\pi(1+\nu)|f|/q_c(\alpha)$. В частности, при $\alpha = 0$ и $\nu = 0.3$ с учетом $q_c(0) \approx 2.43$, получаем: $\omega_c \approx 13.4|f|$. Для системы AlN/6H-SiC (характеризующейся несоответствием $f = 0.009$) последнее соотношение дает: $\omega_c \approx 0.12 \approx 6.9^\circ$, а для системы GaN/6H-SiC (с $f = -0.0357$) из этого соотношения получаем: $\omega_c \approx 27.4$. Существенное отличие значений параметра ω_c для AlN/6H-SiC и GaN/6H-SiC объясняет различие в поведении зависимостей $\Delta W(L)$ для этих двух систем (см. рис. 3.3a и 3.3b). В частности, вследствие относительно малого значения ω_c для AlN/6H-SiC на зависимостях $\Delta W(L)$ для этой системы при $\omega = 20^\circ$ и 30° появляются минимумы, в то время как минимумы на зависимостях $\Delta W(L)$ для системы GaN/6H-SiC (характеризуемой большим значением ω_c) отсутствуют (при $L < 5$ nm) даже при $\omega = 30^\circ$.

Рассмотрим зарождение бесконечного модельного ряда дисклинационных диполей в системе пленка/подложка (Рис. 3.2). Зарождение такого ряда диполей дисклинаций несоответствия, характеризуется разностью $\Delta W'$ энергий (на единицу площади сечения пленки, параллельного ее свободной поверхности) системы пленка–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:

$$\Delta W' = \frac{1}{p} \left(E_{self}^{\Delta} + E_{int}^{\Delta-f} + E_{int}^{\Delta-\Delta} \right), \quad (3.6)$$

где энергии E_{self}^{Δ} и $E_{int}^{\Delta-f}$ задаются формулами (3.2) и (3.3) соответственно, а $E_{int}^{\Delta-\Delta}$ – энергия взаимодействия между диполями дисклинаций (на один

диполь и на единицу длины дисклинации). Энергия $E_{\text{int}}^{\Delta-\Delta}$ рассчитывается с помощью известной формулы [102] парного взаимодействия между дисклинациями. В результате получаем:

$$E_{\text{int}}^{\Delta-\Delta} = D\omega^2 \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{i-1} \left(h_i h'_i + \frac{(h_i - h'_i)^2 + (jp + p_i)^2}{4} \ln \frac{(h_i - h'_i)^2 + (jp + p_i)^2}{(h_i + h'_i)^2 + (jp + p_i)^2} \right), \quad (3.7)$$

где $h_1 = h_2 = h'_1 = h'_4 = h$; $h_3 = h_4 = h'_2 = h'_3 = h + L \cos \alpha$; $p_1 = p_3 = 0$; $p_{2,4} = \pm L \sin \alpha$. Формулы (3.2), (3.3), (3.6) и (3.7) позволяют рассчитать разность $\Delta W'$ полных энергий дефектной системы.

Проведем численный расчет зависимостей разности энергий $\Delta W'$ от основных параметров дефектной структуры на примере систем пленка/подложка типа AlN/6H-SiC и GaN/6H-SiC. Значения упругих модулей (G и ν) и несоответствия f для AlN/6H-SiC и GaN/6H-SiC приведены выше при построении зависимостей на Рис. 3.3 и Рис. 3.4.

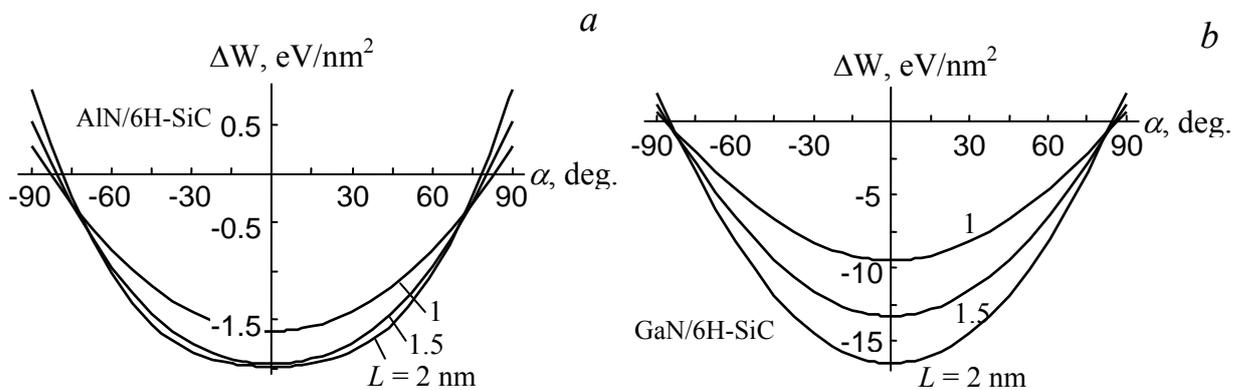


Рис. 3.5 Зависимости изменения энергии системы $\Delta W'$ от угла α (который задает направление межзеренного скольжения) при различных значениях плеча L дисклинационных диполей в системах пленка–подложка AlN/6H-SiC (a) и GaN/6H-SiC (b).

На Рис. 3.5 представлены результаты численного расчета зависимостей $\Delta W'$ от угла α для систем AlN/6H-SiC (рис. 3.5a) и GaN/6H-SiC (рис. 3.5b) при значениях плеча L дисклинационных диполей: $L = 1$ nm, 1.5 nm и 2 nm.

В расчетах использовались следующие параметры дефектной структуры: $p = 30$ nm, $H = 30$ nm, $h = H/2$; $\omega = 10^\circ$ и -20° для AlN/6H-SiC и GaN/6H-SiC. Из Рис. 3.5 видно, что для всех систем пленка/подложка наиболее выгодными (с энергетической точки зрения) для зарождения дисклинационных диполей являются границы зерен, плоскости которых ориентированы перпендикулярно свободной поверхности пленки ($\alpha = 0^\circ$). При этом увеличение плеча L дисклинационных диполей увеличивает выигрыш в полной энергии системы.

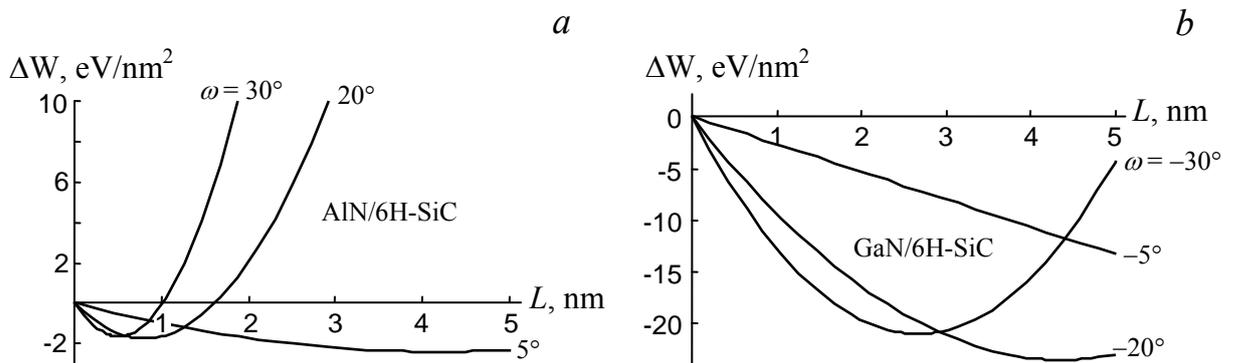


Рис. 3.6 Зависимости изменения энергии системы $\Delta W'$ от плеча L дисклинационных диполей при различных значениях мощности ω дисклинационных диполей в системах пленка–подложка AlN/6H-SiC (a) и GaN/6H-SiC (b).

Далее рассмотрим зависимости разности энергий $\Delta W'$ от плеча L дисклинационных диполей при значениях мощности ω и значениях $\alpha = 0^\circ$, $p = 30$ nm, $H = 30$ nm, $h = H/2$. Эти зависимости $\Delta W'(L)$ представлены на Рис. 3.6a и b для систем AlN/6H-SiC и GaN/6H-SiC соответственно. Из Рис. 3.6a видно, что, в случае системы AlN/6H-SiC на всех представленных зависимостях $\Delta W'(L)$ имеются точки минимума, соответствующие положению устойчивого равновесия дисклинаций, а именно положению, которое характеризуется некоторым равновесным значением плеча L_e дисклинационных диполей. В случае системы GaN/6H-SiC на кривых $\Delta W'(L)$ при $\omega = 5^\circ$ точки минимума отсутствуют, что свидетельствует о

возможности неограниченного расширения (увеличения L) дисклинационных диполей.

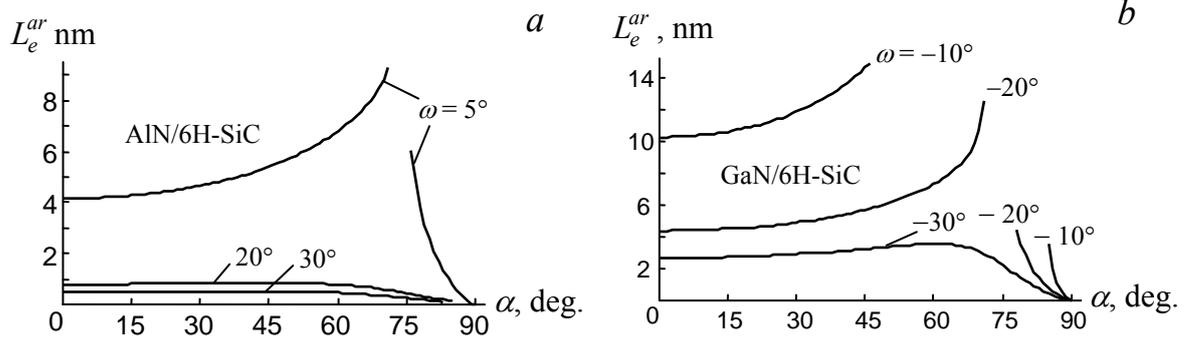


Рис. 3.7 Равновесное плечо L_e^{ar} дисклинационных диполей как функция угла α при различных значениях мощности ω дисклинационных диполей для систем пленка–подложка AlN/6H-SiC (a) и GaN/6H-SiC (b).

На Рис. 3.7 представлены оценки равновесной длины L_e^{ar} плеча дисклинационных диполей в зависимости от величины угла α при различных значениях мощности ω дисклинационных диполей для систем AlN/6H-SiC (Рис. 3.7a) и GaN/6H-SiC (Рис. 3.7b) при $p = 30$ nm, $H = 30$ nm и $h = H/2$. Поскольку дефектная конфигурация симметрична относительно плоскости с $\alpha = 0^\circ$, то на Рис. 3.7 рассматривается интервал углов $0^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$. Из зависимостей $L_e^{ar}(\alpha)$ (Рис. 3.7) следует, что уменьшение мощности ω дисклинационных диполей увеличивает значение равновесного плеча L_e^{ar} дисклинационных диполей. При определенных значениях углов α ($\alpha > 45^\circ$) и мощности ω (при $\omega = 5^\circ$ для AlN/6H-SiC (Рис. 3.7a), и $\omega = -10^\circ$ и -20° для GaN/6H-SiC (Рис. 3.7b)) на кривых $L_e^{ar}(\alpha)$ имеются разрывы, которые соответствуют режиму неограниченного роста плеч дисклинационных диполей.

3.2 Релаксация напряжений несоответствия путем зернограницной диффузии в нанокристаллических пленках

В этом разделе будет 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», которая состоит из нанокристаллической пленки толщиной H и полубесконечной монокристаллической подложки (Рис. 3.8а). Вследствие различия между параметрами кристаллических решеток подложки и пленки в пленке присутствуют напряжения несоответствия. Предполагается, что пленка и подложка являются упругоизотропными твердыми телами. Граница между пленкой и подложкой характеризуется дилатационным несоответствием $f = (a_s + a_f)/a_f$, где a_f и a_s – параметры кристаллической решетки пленки и подложки соответственно. В общем случае поля внутренних напряжений в нанокристаллической пленке задаются многими факторами, в частности, ориентацией зерен относительно кристаллической решетки подложки, дилатационным несоответствием f , различием коэффициентов термического расширения материалов пленки и подложки (например, [170-172]). Учет всех таких факторов представляется весьма трудоемкой отдельной задачей, которая выходит за рамки настоящей работы. В рамках предлагаемой модели мы воспользуемся приближенным описанием внутренних напряжений в нанокристаллической пленке. Будем предполагать, что внутренние 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 [170,171]:

$$\sigma_f = \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)}(f - \varepsilon_c) \quad (3.8)$$

В формуле (3.8) 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.

В монокристаллических и поликристаллических пленках пластическая деформация, обеспечивающая релаксацию напряжений несоответствия, обычно осуществляется посредством зарождения решеточных дислокаций на свободной поверхности пленки и их перемещения на межфазную границу «пленка/подложка» [170-172]. Это соответствует доминирующей моде пластической деформации в монокристаллических и поликристаллических материалах – решеточному дислокационному скольжению. В нанокристаллических материалах моды деформации, реализуемые в границах зерен, вносят существенный (нередко определяющий) вклад в пластическую деформацию. В частности, пластическая деформация посредством диффузионного массопереноса по границам зерен (называемая деформацией Кобла) вносит значимый вклад в пластическую деформацию массивных нанокристаллических образцов, особенно при низких скоростях пластического деформирования и повышенных температурах [173–175]. Будем предполагать, что пластическая деформация посредством диффузионного массопереноса по границам зерен происходит также и в нанокристаллических пленках и покрытиях под действием напряжений несоответствия (Рис. 3.8). В случае $f < 0$, изображенном на Рис. 3.8, рассматриваемая деформация (деформация Кобла) приводит к удлинению зерен в вертикальном направлении (перпендикулярном межфазной границе «пленка–подложка») за счет типичного для деформации Кобла массопереноса с боковых вертикальных граней зерен на горизонтальные

границы (параллельные межфазной границе «пленка–подложка»). Такой массоперенос фактически приводит к зарождению зернограницных дислокаций несоответствия, которые вызывают, по меньшей мере, частичную релаксацию напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Оставляя за рамками настоящей работы аспекты, связанные с детализацией геометрии зернограницных дислокаций несоответствия и их энергетическими характеристиками, мы рассмотрим далее кинетику релаксации напряжений несоответствия посредством деформации Кобла в нанокристаллических пленках. (В частности, мы предполагаем, что толщина H пленки или покрытия достаточно велика, чтобы обеспечить энергетическую выгодность зарождения большого числа зернограницных дислокаций несоответствия, а именно числа, достаточного для практически полной релаксации напряжений несоответствия.)

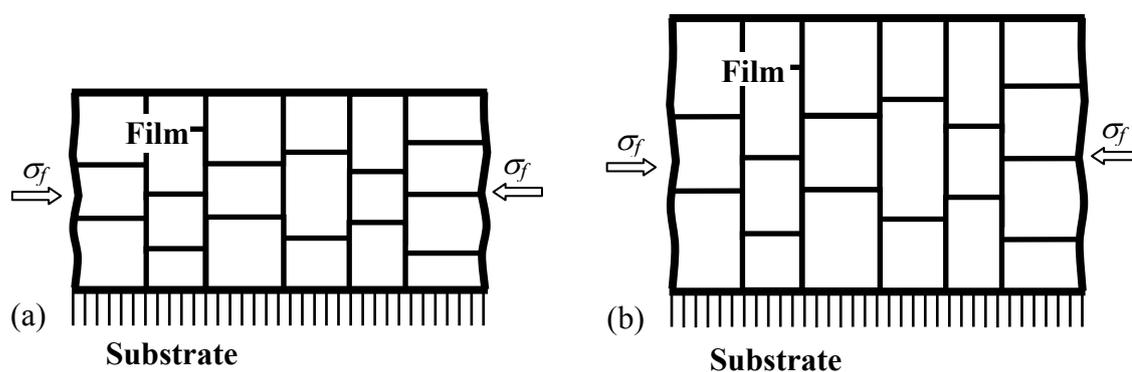


Рис. 3.8. Релаксация напряжений несоответствия в нанокристаллической пленке посредством ускоренного диффузионного массопереноса по границам зерен (схематично). (a) Исходная конфигурация модельной системы «нанокристаллическая пленка/подложка». Нанокристаллическая пленка состоит из зерен с прямоугольным сечением. (b) Пластическая деформация посредством диффузионного массопереноса по границам зерен приводит к удлинению зерен в вертикальном направлении (перпендикулярном межфазной границе «пленка/подложка») за счет массопереноса с боковых вертикальных граней зерен нанокристаллической пленки на горизонтальные грани (параллельные межфазной границе «пленка/подложка»).

В рассматриваемом случае в соответствии с теорией деформации Кобла в нанокристаллических материалах [174,176] выражение для скорости деформации Кобла $\dot{\varepsilon}_c$ имеет следующий вид:

$$\dot{\varepsilon}_c = \alpha \frac{\Omega \pi \delta}{k_B T} D_{gb} d^{-3} \sigma_f \quad (3.9)$$

где k_B – постоянная Больцмана, D_{gb} – коэффициент зернограничной диффузии в нанокристаллической пленке, Ω – объем атома пленки, δ – толщина границы зерен в пленке, T – температура, d – размер зерна, α – коэффициент, который в общем случае зависит от типа напряженного состояния в образце. В первом приближении для оценки α мы используем характерное значение [176] этого коэффициента для случая одноосного растяжения или сжатия массивного поликристаллического образца и положим $\alpha = 14$. Подставляя выражение (3.8) в формулу (3.9), получаем дифференциальное уравнение относительно ε_c :

$$\frac{d\varepsilon_c}{dt} = A(f - \varepsilon_c) \quad (3.10)$$

где $A = \frac{28G\pi(1+\nu)}{k_B T(1-\nu)V} D_{gb}$, $V = d^3$ – объем зерна, t – время. Разделив

переменные и проинтегрировав уравнение (3.10) с учетом начального условия $\varepsilon_c(t=0) = 0$, получаем формулу для деформации, вызванной диффузией по границам зерен (диффузией по Коблу):

$$\varepsilon_c(V) = f[1 - \exp(-At)]. \quad (3.11)$$

В нанокристаллических материалах распределение по размерам зерен носит статистический характер. Следуя работе [174], полагаем, что объем зерен V подчиняется логнормальному распределению:

$$f(V) = \frac{1}{V\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left[-\frac{(\ln V - m_{\ln V})^2}{2s^2}\right] \quad (3.12)$$

где $m_{\ln V}$ и s – соответственно среднее значение и среднеквадратичное отклонение $\ln V$. Среднее значение объема зерна m_V определяется выражением [174]

$$m_V = \int_0^{\infty} Vf(V)dV = \exp\left[m_{\ln V} + \frac{s^2}{2}\right] \quad (3.13)$$

Среднее значение объема зерна m_V также может быть представлено в виде [174] $m_V = k\bar{d}_3$, где \bar{d} – средний размер зерна, k – геометрический фактор, который в нашем случае полагается равным 1. Подставляя формулу (3.13) и выражение $m_V = \bar{d}_3$ в формулу (3.12), получаем:

$$f(V) = \frac{1}{V\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left[-\frac{(\ln(V/\bar{d}^3) + s^2/2)^2}{2s^2}\right] \quad (3.14)$$

Применим теперь процедуру усреднения к выражению (3.11) для деформации по Коблу. Средняя деформация $\bar{\varepsilon}_c$ в нанокристаллической пленке определяется деформацией $\varepsilon_c(V)$ в каждом отдельном зерне и распределением $f(V)$ зерен по размерам и рассчитывается по формуле

$$\bar{\varepsilon}_c = \frac{1}{m_V} \int_0^{\infty} \varepsilon_c(V) Vf(V)dV \quad (3.15)$$

В рамках нашей модели диффузионный массоперенос по границам зерен приводит к релаксации напряжений несоответствия. Количественно это выражается в уменьшении абсолютного значения эффективного несоответствия $f_{eff} = f - \bar{\varepsilon}_c$. С помощью формул (3.11), (3.14) и (3.15) построим зависимость модуля $|f_{eff}|$ эффективного несоответствия от времени t для металлических систем Ni/Cu и Cu/Ag при различных значениях среднего размера \bar{d} зерен. На Рис. 3.9 представлены зависимости $|f_{eff}(t)|$ для систем «нанокристаллическая пленка/подложка» Ni/Cu (Рис. 3.9а) и Cu/Ag (Рис. 3.9б) при значениях среднего размера зерен $\bar{d} = 10, 20$ и 30 nm (кривые 1,2 и 3 соответственно). Зависимости $|f_{eff}(t)|$ были построены при

следующих значениях параметров. Для системы Ni/Cu: $G = 73 \text{ GPa}$, $\nu = 0.31$, $\Omega = 1.094 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$ [177], $\delta = 0.5 \text{ nm}$, $D_{gb} = 9.2 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2/\text{sec}$ [178], $T = 290 \text{ K}$, $f = -0.026$ [140]. Для системы Cu/Ag: $G = 46 \text{ GPa}$, $\nu = 0.38$, $\Omega = 1.181 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$ [177], $\delta = 0.5 \text{ nm}$, $D_{gb} = 2 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2/\text{sec}$ [178], $T = 290 \text{ K}$, $f = -0.14$ [179]. Исходя из результатов работы [174], величина среднеквадратичного отклонения s была взята равной 1.

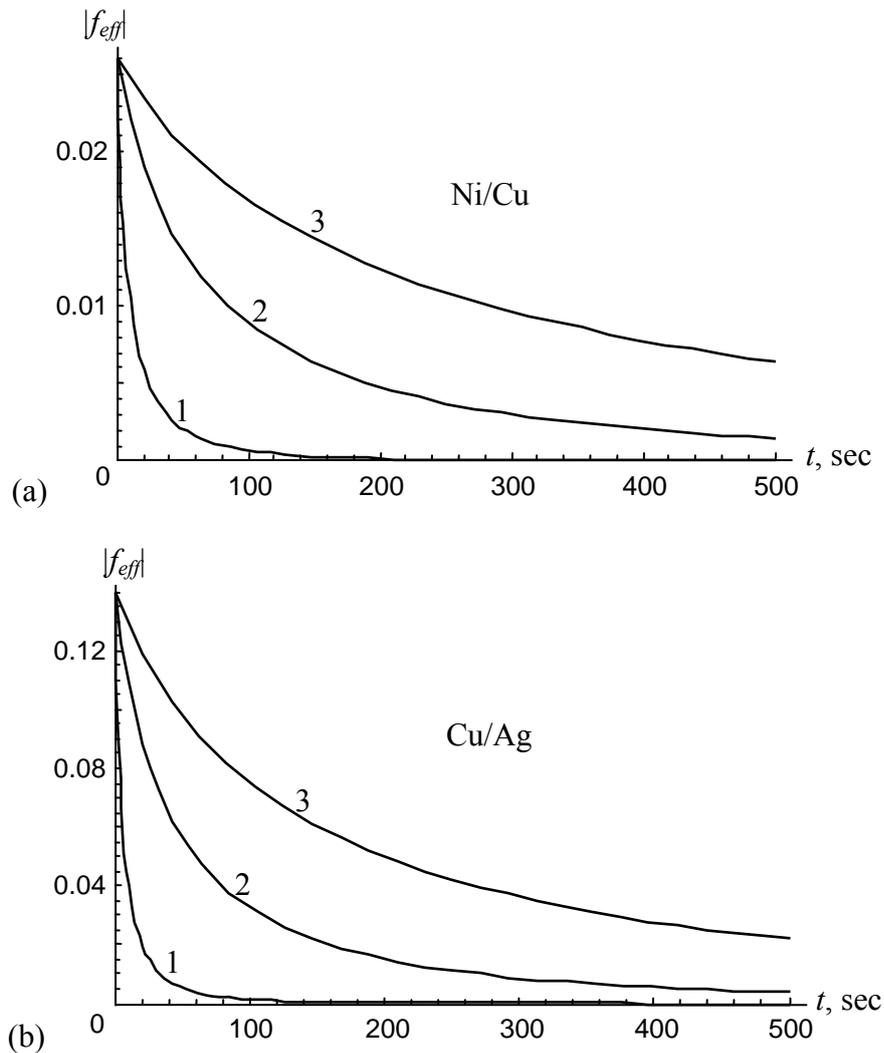


Рис. 3.9 Зависимости абсолютной величины $|f_{eff}|$ эффективного несоответствия от времени t для нанокристаллических систем Ni/Cu (a) и Cu/Ag (b) при различных значениях среднего размера зерна $\bar{d} = 10, 20$ и 30 nm (кривые 1, 2 и 3 соответственно).

Как следует из Рис. 3.9, 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 или 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. Аналогичная ситуация имеет место и в системе Cu/Ag, где при $d=10$ nm исходное эффективное несоответствие уменьшается в 5 раз через 15 секунд, а при $d=30$ nm – через 6.5 минут после начала диффузии.

3.3 Резюме

Таким образом, согласно результатам представленным в разделе 3.1, процесс зарождения дисклинационных диполей при межзеренном скольжении в нанокристаллической пленке в определенных условиях способен существенно уменьшить упругую энергию композита пленка–подложка. В частности, в рамках предложенной теоретической модели показано, что зарождение дисклинационных диполей в пленке (покрытии) энергетически выгодно в композитах пленка–подложка для систем AlN/6H-SiC и GaN/6H-SiC в широком интервале их структурных параметров. Как следствие, образование диполей дисклинаций (ротационных дефектов) при межзеренном скольжении служит эффективным механизмом релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях.

Аналогично процессу зарождения дисклинационных диполей, согласно результатам полученным в разделе 3.2, ускоренный диффузионный массоперенос по границам зерен является эффективным микромеханизмом релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Действие такого микромеханизма эффективно именно в нанокристаллических пленках, в которых высока объемная доля, занимаемая границами зерен, и малоэффективно в поликристаллических пленках.

ГЛАВА 4

ВЛИЯНИЕ НАНОМАСШТАБНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ЗАРОЖДЕНИЕ И РОСТ ТРЕЩИН В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Нанокристаллические твердые тела обычно имеют высокую твердость, прочность и износостойкость. Вместе с тем, нанокристаллические керамики и металлы в подавляющем числе случаев характеризуются низкими показателями пластичности и трещиностойкости [160,175,180-184], которые крайне нежелательны для их практических приложений. В частности, низкая трещиностойкость нанокристаллических керамик представляет собой основной фактор, препятствующий широкому технологическому применению таких керамик [181,183]. 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 [180,185,186]), вследствие особенностей нанокристаллической структуры. Вместе с тем, известны несколько примеров получения высокопрочных нанокристаллических керамик с достаточно высокими показателями трещиностойкости [181,187-190]. Природа сочетания высокой прочности и функциональной трещиностойкости таких нанокристаллических керамик экспериментально не идентифицирована и является предметом интенсивных дискуссий [180-182,191]. 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 микромеханизмами, в частности, являются торможение трещин за счет эффектов локальной миграции границ зерен [192,193], ротационной деформации [194], зернограничного скольжения [195], а также комбинированного действия зернограничного скольжения и поворотов зерен

[196,197]. В этой главе мы рассмотрим новый специфический микромеханизм торможения трещин в нанокристаллических материалах, а именно торможение за счет зарождения наноскопических зерен вблизи вершин трещин. На данный момент существуют экспериментальные данные [198-200] подтверждающие образование нанозерен и их агломератов в нанокристаллических и мелкозернистых материалах. На Рис. 4.1 представлены микроснимки структуры нанокристаллического кобальта, на которых стрелками отмечены новые нанозерна, зародившиеся на границах и тройных стыках границ относительно больших зерен [198].

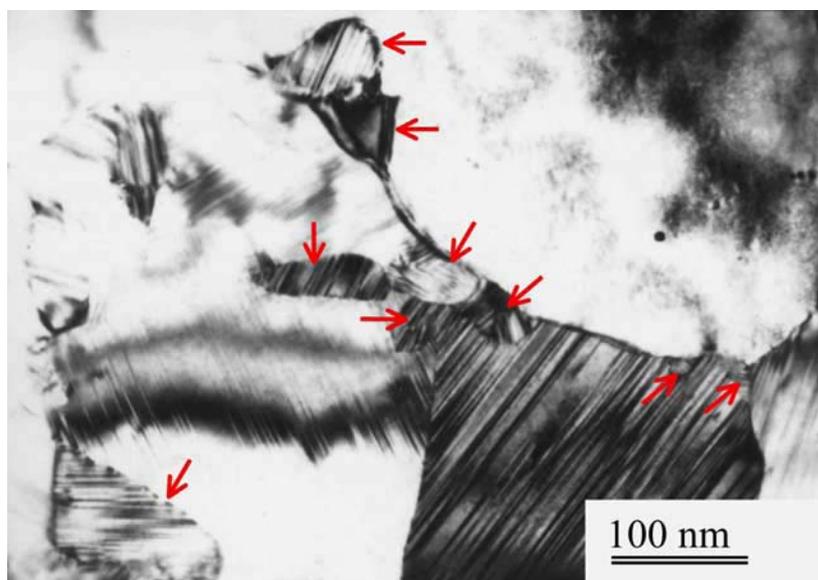


Рис. 4.1 Образование нанокристаллических зерен на границах зерен и их тройных стыках в нанокристаллическом кобальте (Co) [198].

Основной целью настоящей главы является разработка теоретических моделей зарождения отдельных наноскопических зерен и цепочек наноскопических зерен вблизи вершин трещин в деформируемых наноматериалах, и исследование влияния процесса зарождения таких зерен на рост трещин в НКМ. Также в этой главе будет рассмотрено влияние включений другой фазы на распространение ранее зародившихся микротрещин. При написании Главы 4 использовались материалы, опубликованные автором в соавторстве в работах [4а,6а,9а,11а,13а,18а,20а,25а].

4.1 Зарождения новых наноскопических зерен вблизи вершин трещин в деформируемых нанокристаллических твердых телах

В этом разделе будет разработана теоретическая модель, в рамках которой происходит зарождение новых наноскопических зерен, имеющих форму параллелограмма, вблизи вершин трещин. Затем будет проведен анализ влияния процесса зарождения новых нанозерен, вблизи вершин трещин на дальнейший рост этих трещин в нанокристаллических материалах.

4.1.1 Условия образования нанозерна вблизи вершины трещины в нанокристаллических твердых телах

Рассмотрим нанокристаллический образец со средним размером зерна d , содержащий трещину I типа и находящийся под действием внешней одноосной растягивающей нагрузки σ_0 .

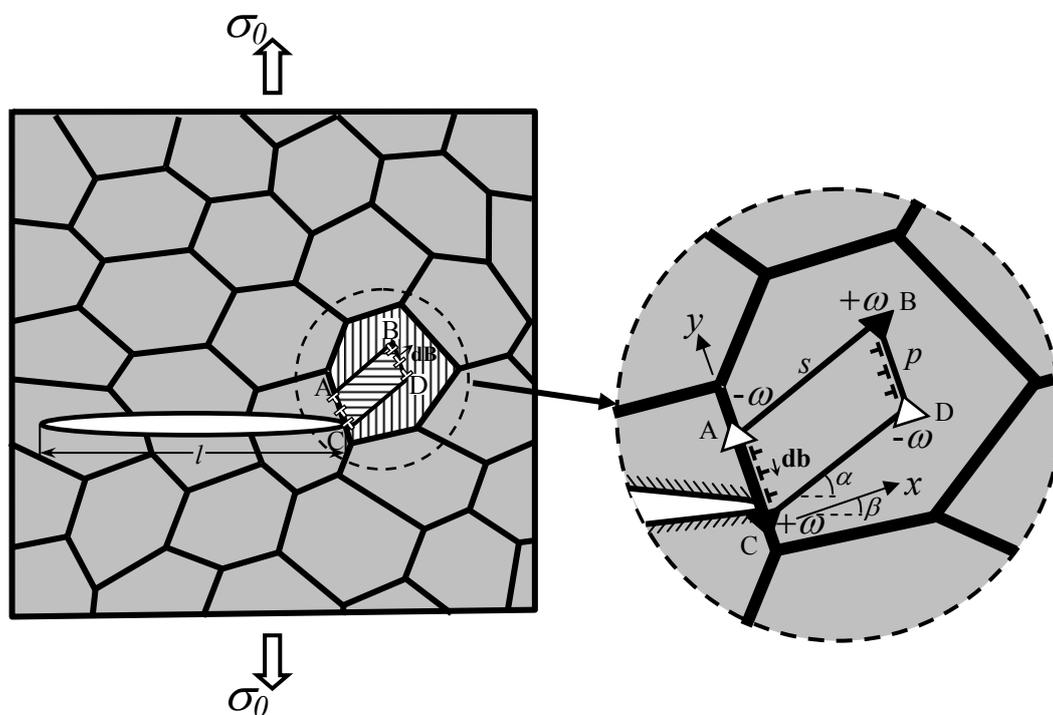


Рис. 4.2 Зарождение нового нанозерна, имеющего форму параллелограмма и, связанной с ним, дефектной структуры вблизи вершины трещины в деформируемом нанокристаллическом твердом теле (схематично).

2-мерное сечение нанокристаллического образца с плоской трещиной длиной l схематически представлено на Рис. 4.2. Для простоты, мы предполагаем, что структура материала не меняется вдоль оси z , которая перпендикулярна плоскости xu , изображенной на Рис. 4.2.

Это предположение позволяет нам значительно упростить математический анализ поставленной задачи (теоретического описания зарождения нанозерен и их влияния на рост трещин в нанокристаллических материалах), сводя задачу к рассмотрению 2-мерной структуры. В тоже время, 2-мерный случай определенно отражает все основные аспекты задачи. Также предполагается, что трещина ориентирована перпендикулярно направлению действию внешней нагрузки σ_0 , то есть является трещиной нормального отрыва (Рис. 4.2). Такая геометрия трещины наиболее опасна для целостности деформируемого образца. В системе координат, изображенной на Рис. 4.2, трещина распространяется вдоль оси x и расположена в области $0 < x < l$. Также, в рамках модели нанокристаллический образец представляет собой упруго-изотропное твердое тело, которое характеризуется модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν .

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. 4.2). В рамках подхода, предложенного в работах [201,202], зарождение нанозерен может служить специфическим микромеханизмом деформации, который реализуется в три этапа: (i) расщепление фрагмента $A'C'$ границы зерна (этот фрагмент не показан на Рис. 4.2) на неподвижную границу AC (расположенную в том же месте, что и фрагмент $A'C'$) и подвижную границу BD ; (ii) миграция границы зерна BD ; (iii) образование двух новых границ зерен AB и CD (Рис. 4.2). Рост зерен, осуществляемый за счет миграции

границ зерен, связан с пластическим сдвигом в нанокристаллических материалах [201,202] таким же образом, как и индуцируемая напряжением миграция границы зерна [192,193] (границы зерна BD в рассматриваемом случае). При этом пластическому сдвигу в наноскопической области, окруженной пластически недеформированным материалом, препятствует этот окружающий материал. В результате пластический сдвиг является незавершенным и приводит к образованию пластической несовместности и соответствующих упругих полей. Последние в духе подхода [201,202] эффективно моделируется как упругие поля двух диполей клиновых дисклинаций с мощностями $\pm \omega$ (Рис. 4.2). Новое зерно $ABCD$ может иметь форму прямоугольника или параллелограмма в зависимости от формы области, «заметаемой» границей BD при ее миграции.

В настоящей работе предполагается, что зарождающиеся нанозерно, имеет форму параллелограмма (Рис. 4.2) вблизи вершины трещины в нанокристаллическом образце. Зерно (параллелограмм) имеет наноскопические размеры s и p , которые также являются расстояниями между дисклинациями (Рис. 4.2). Ориентация зерна $ABCD$ относительно плоскости трещины задается углами α и β (Рис. 4.2).

В рамках предлагаемой модели границы зерен AC и BD являются асимметричными границами наклона, а границы зерен AB и CD являются симметричными границами наклона и характеризуются углом разориентировки ω' (который является параметром исследуемой дефектной структуры).

Каждая из асимметричных границ наклона AC и BD и симметричных границ наклона AB и CD может быть представлена в виде стенок непрерывно распределенных дислокаций с бесконечно малым вектором Бюргерса $d\vec{B}$ и $d\vec{B}'$, соответственно (Рис. 4.3а). При этом Вектор Бюргерса $d\vec{B}$ образует угол $\alpha - \beta$ с плоскостью соответствующей границы (Рис. 4.3а). Дислокация $d\vec{B}$,

моделирующие асимметричные границы наклона AC или BD представимы в виде суперпозиции двух дислокаций.

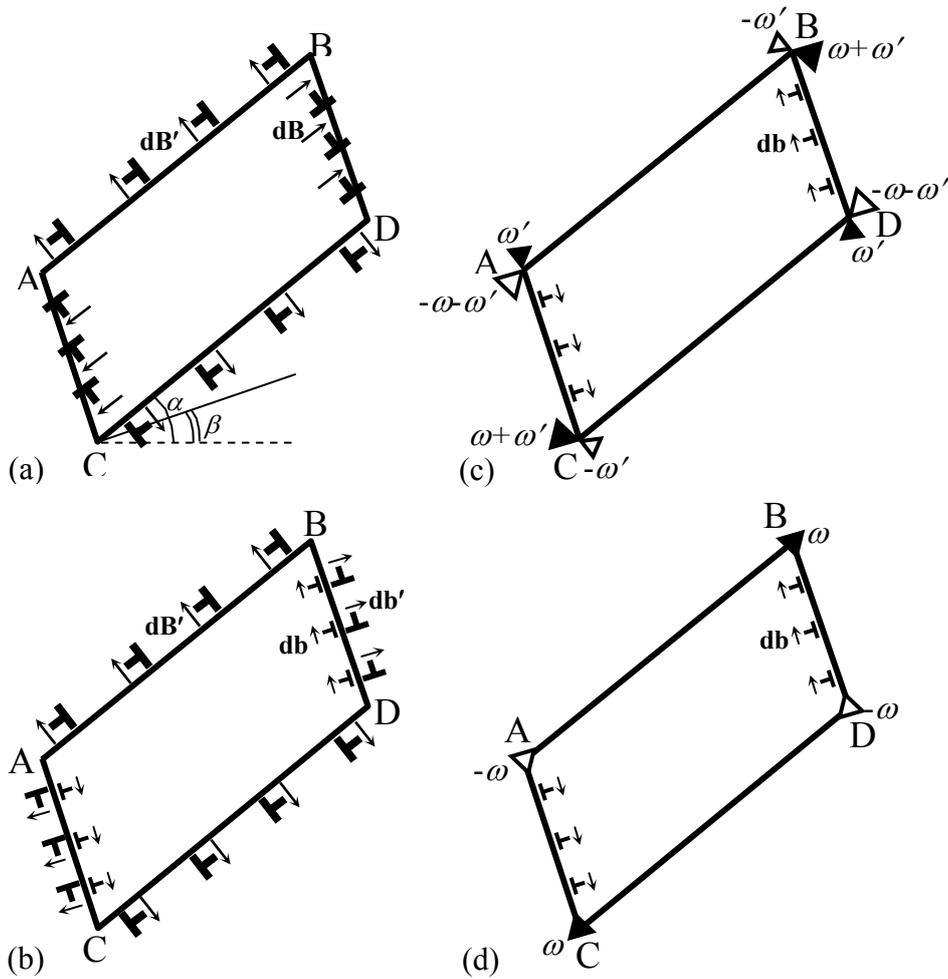


Рис. 4.3 Дислокационно-дисклинационное представление границ нового нанозерна.

(а) Дислокационные модели асимметричных границ наклона AC и BD и симметричных границ наклона AB и CD . Асимметричные границы наклона AC и BD представимы в виде стенок $d\vec{B}$ -дислокаций. Симметричные границы наклона AB и CD представимы в виде стенок $d\vec{B}'$ -дислокаций. (b) Разложение стенок $d\vec{B}$ -дислокаций на два ряда $d\vec{b}$ -дислокаций и две стенки $d\vec{b}'$ -дислокаций. (c) Представление стенок $d\vec{B}'$ -дислокаций и $d\vec{b}$ -дислокаций в виде дисклинационных диполей с мощностями ω' и $\omega + \omega'$, соответственно. (d) Дефектная структура, образовавшаяся в результате частичной компенсации разориентировок асимметричных границ наклона AC и BD за счет симметричных границ наклона AB и CD в стыках А, В, С и D этих границ.

Этими дислокациями являются дислокации с вектором Бюргера $d\vec{b}$ (db -дислокации), который параллелен плоскости соответствующей границы

зерен (AC или BD), и дислокации с вектором Бюргерса $d\vec{b}'$ (db' -дислокации), который перпендикулярен плоскости соответствующей границы зерен (AC или BD) (Рис. 4.3b). Таким образом, границы зерен AC и BD представляются в виде двух рядов db -дислокаций и двух стенок db' -дислокаций (Рис. 4.3b), модули векторов Бюргерса которых связаны с вектором Бюргерса $d\vec{B}$ следующими выражениями: $db = dB \sin(\alpha - \beta)$ и $db' = dB \cos(\alpha - \beta)$.

Стенки db' -дислокаций имеют конечную длину, т.е. являются оборванными дислокационными стенками. Согласно теории дефектов в твердых телах [102], каждая оборванная дислокационная стенка создает поля напряжений, эквивалентные полям напряжений диполя клиновых дисклинаций. Таким образом, стенки db' -дислокаций могут быть представлены в виде двух диполей клиновых дисклинаций мощностью $\omega + \omega'$ (Рис. 4.3c). Аналогично стенки db -дислокаций, моделирующие симметричные границы наклона AB и CD , эквивалентны двум диполям клиновых дисклинаций мощностью ω' (Рис. 4.3c). В этом случае вектор Бюргерса $d\vec{B}$ -дислокаций связан с мощностью $\omega + \omega'$ дисклинаций следующим выражением $dB = (\omega + \omega')dp$, а вектор Бюргерса рядов db -дислокаций - выражением $db = (\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta) dp$. Дисклинации в стыках границ зерен A , B , C и D с мощностью ω' (моделирующие симметричные границы наклона AB и CD) имеют знак противоположный знаку дисклинаций с мощностью $\omega + \omega'$ (моделирующих ассиметричные границы наклона AC и BD) (Рис. 4.3c). В результате происходит частичная компенсация разориентировки $\omega + \omega'$ ассиметричных границ наклона AC и BD за счет симметричных границ наклона AB и CD с разориентировкой ω' , что эквивалентно образованию дефектной структуры, состоящей из двух дисклинационных диполей с мощностью ω и двух рядов db -дислокаций (Рис. 4.3d).

Зарождение нанозерна (Рис. 4.2) 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 $\Delta W < 0$. Разность энергий ΔW (на единицу длины вдоль оси z) может быть записана в виде суммы трех слагаемых:

$$\Delta W = 2E^\Delta + 2E^b + E^{b-b} + E^{\Delta-\Delta} + \Delta E_{gb}, \quad (4.1)$$

где E^Δ – собственная энергия дисклинационных диполей, E^b – собственная энергия рядов db -дислокаций, $E^{\Delta-\Delta}$ – энергия взаимодействия между дисклинационными диполями, E^{b-b} – энергия взаимодействия между рядами db -дислокаций, $E^{q-\sigma}$ – суммарная энергия взаимодействия дисклинационных диполей и рядов db -дислокаций с полем сдвиговых напряжений σ_{ij}^c , созданных в теле с трещиной внешней нагрузкой σ_0 , ΔE_{gb} – разность энергий границ зерен в конечном и начальном состояниях.

В первом приближении мы пренебрежем влиянием трещины на энергию дисклинационных диполей E^Δ и для расчета этой энергии воспользуемся известным выражением [102] для энергии дисклинационного диполя в бесконечном изотропном теле:

$$E^\Delta = \frac{D\omega^2 p^2}{2} \left(\ln \frac{R}{p} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.2)$$

Здесь $D = G/2\pi(1-\nu)$, R – радиус экранирования полей напряжений, который принимается равным $R = s \approx d$, где d – размер зерна наноматериала.

Собственная энергия E^b дислокационного ряда db -дислокаций задается следующим образом [90,91]:

$$E^b = \frac{Db^2}{2} \left(\ln \frac{R}{r} + 1 \right), \quad (4.3)$$

где $b = (\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta)p$ – суммарный вектор Бюргерса всех дислокаций ряда, $r \approx b$ – суммарный радиус экранирования ядер всех db -дислокаций.

Энергия взаимодействия $E^{\Delta-\Delta}$ между дисклинационными диполями AC и BD рассчитывается как работа по зарождению одного диполя в поле напряжений другого:

$$E^{\Delta-\Delta} = -\omega \int_{y'}^{y'+p} \int_{x'}^R \sigma_{xy}^{\Delta} dx dy, \quad (4.4)$$

где σ_{xy}^{Δ} – сдвиговая компонента поля напряжений дисклинационного диполя AC , $x' = s \cos(\alpha - \beta)$, $y' = s \sin(\alpha - \beta)$.

Энергия взаимодействия E^{b-b} между рядами db -дислокаций AC и BD рассчитывается аналогичным образом как работа по зарождению одного ряда в поле напряжений другого. Для расчета этой энергии вычислим сдвиговую компоненту поля напряжений дислокационного ряда AC , используя известное выражение для поля напряжения краевой дислокации [90,91]:

$$\sigma_{xy}^{bb} = D(\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta) \int_0^p \frac{x(x^2 - (y - p')^2)}{(x^2 + (y - p')^2)^2} dp' \quad (4.5)$$

С помощью формулы (4.5) получим выражение для энергии взаимодействия E^{b-b} :

$$E^{b-b} = -(\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta) \int_{y'}^{y'+p} \int_{y'+p'}^R \sigma_{xy}^{bb}(x = x') dy dp', \quad (4.6)$$

Энергия $E^{q-\sigma}$ рассчитывается как работа по зарождению дисклинационных диполей и дислокационных рядов в поле внешнего напряжения вблизи вершины трещины (являющейся концентратором внешнего напряжения):

$$E^{\sigma} = -\omega \left(\int_0^p \int_0^R \sigma_{xy}^c dx dy + \int_{y'}^{y'+p} \int_{x'}^R \sigma_{xy}^c dx dy \right) - \quad (4.7)$$

$$(\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta) \left(\int_0^p \int_{p'}^R \sigma_{xy}^c(x = 0) dy dp' + \int_{y'}^{y'+p} \int_{y'+p'}^R \sigma_{xy}^c(x = x') dy dp' \right),$$

где σ_{xy}^c – компонента поля напряжений σ_{ij}^c (см. Приложение А), созданного приложенной нагрузкой σ_0 в твердом теле с трещиной в системе координат (x, y) (Рис. 4.2).

Разность энергий ΔE_{gb} границ зерен задается формулой:
 $\Delta E_{gb} = s\gamma_{AB} + p\gamma_{AC} + s\gamma_{CD} + p\gamma_{BD} - p\gamma_{A'C'}$, где γ_{AB} , γ_{AC} , γ_{CD} и γ_{BD} – удельная энергия (на единицу площади плоскости границы зерна) новых границ зерен AB , AC , CD и BD , тогда как $\gamma_{A'C'}$ представляет собой удельную энергию границы $A'C'$ в исходном состоянии (до зарождения нанозерна). В исследуемом случае мы предполагаем, что все рассматриваемые границы зерен являются высокоугловыми границами наклона. Для таких (широко распространенных) границ зерен, во многих материалах удельная энергия γ границ зерен является слабо возрастающей или примерно постоянной функцией параметра разориентировки θ [203]. Как следствие, для простоты будем считать, что энергии всех границ зерен одинаковы: $\gamma_{AB} = \gamma_{AC} = \gamma_{CD} = \gamma_{BD} = \gamma_{A'C'} = \gamma_b$. В рамках данного предположения получаем:

$$E_{gb} = \gamma_b(2s + p) \quad (4.8)$$

Формулы (4.1)-(4.8) позволяют рассчитать разность энергий ΔW . На примере нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, с помощью формул (4.1)-(4.8) построим зависимость разности энергий ΔW от угла α при различных значениях мощности ω дисклинационных диполей. В расчетах, будем использовать следующие значения параметров для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ [204]: $G = 169$ GPa, $\nu = 0.23$, $\gamma = 1,5$ J/m² [205], $\gamma_b = 0,5$ J/m² [206]. Внешнее напряжение σ_0 положим равным 1 GPa, что характерно для большинства нанокристаллических керамик, а в качестве длины трещины L выберем значение $L = 800$ nm, которое близко (но немного меньше) к значению длины трещины Гриффитса в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ при заданном уровне напряжений. Угол β , для простоты, положим равным $\beta = 0^\circ$. В качестве размера зерна

выберем значение $d = 50 \text{ nm}$, тогда радиус экранирования равен $R \approx d = 50 \text{ nm}$. Также, в качестве разориентировки ω' границ AB и CD выберем значение $\omega' = 20^\circ$. Из зависимостей на Рис. 4.4 видно, 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.

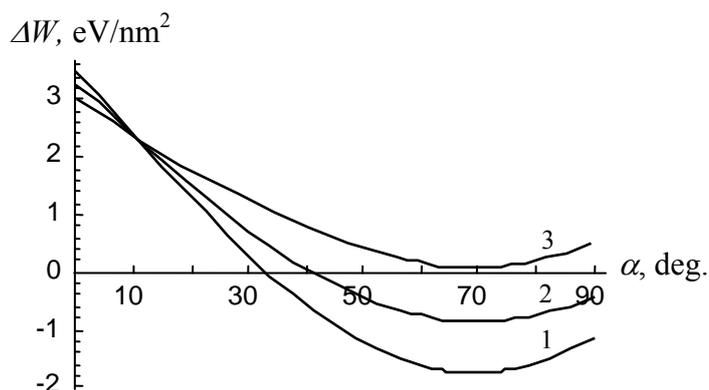


Рис. 4.4 Зависимость характеристической разности энергий ΔW от угла α при различных значениях мощности ω дисклинаций $\omega = 5^\circ$ (кривая 1), 10° (кривая 2) и 15° (кривая 3).

При этом увеличение мощности ω дисклинационных диполей приводит к снижению энергетической выгоды образования нанозерна (Рис. 4.4).

Далее построим зависимость разности энергий ΔW от длин сторон s и p нового нанозерна при тех же параметрах системы и наиболее выгодном значении угла $\alpha = 70^\circ$ (как было показано выше). На Рис. 4.5 представлены расчеты зависимости $\Delta W(s, p)$, проведенные с помощью формул (1)-(8), для указанных параметров нанокристаллического $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Стрелки на Рис. 4.5 показывают направление в пространстве (s, p) , вдоль которого образование/рост нового нанозерна сопровождается наибольшим выигрышем в энергии. Анализ зависимостей на Рис. 4.5 показывает, что рост нового

нанозерна наиболее энергетически выгоден при одновременном увеличении сторон s и p нанозерна.

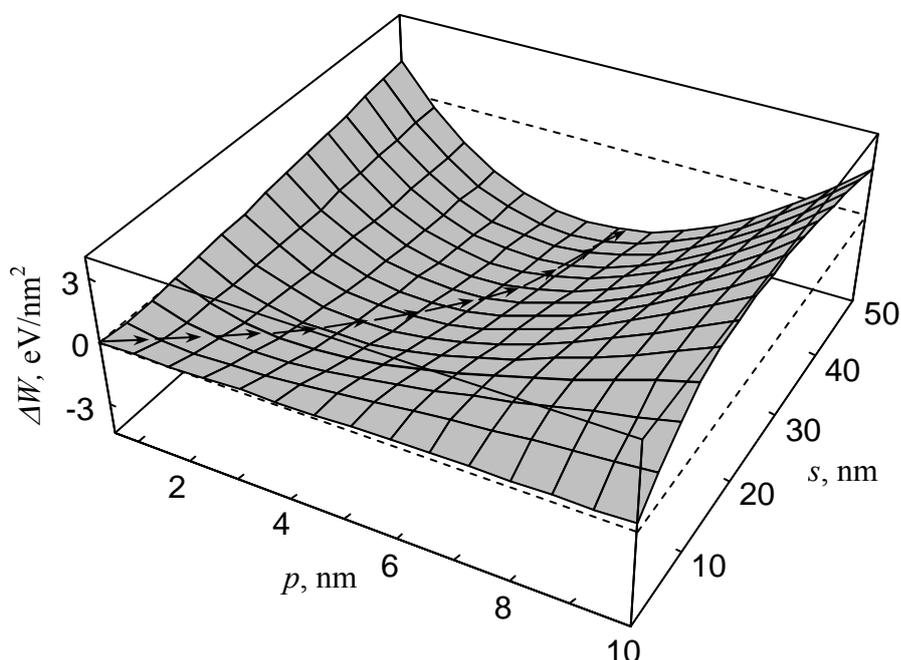


Рис. 4.5 Зависимость характеристической разности энергий ΔW от размеров s и p нанозерна.

Более точно, при каждом значении размера s равновесная форма нанозерна (параллелограмма) определяется некоторым равновесным значением размера p_{eq} , который рассчитан из условия минимума $\Delta W(s, p)$ при данном s .

На Рис. 4.6 представлены зависимости $p_{eq}(s)$ при различных значениях мощности ω дисклинаций. Из зависимостей на Рис. 4.6 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 $\omega_{c1} \leq \omega \leq \omega_{c2}$.

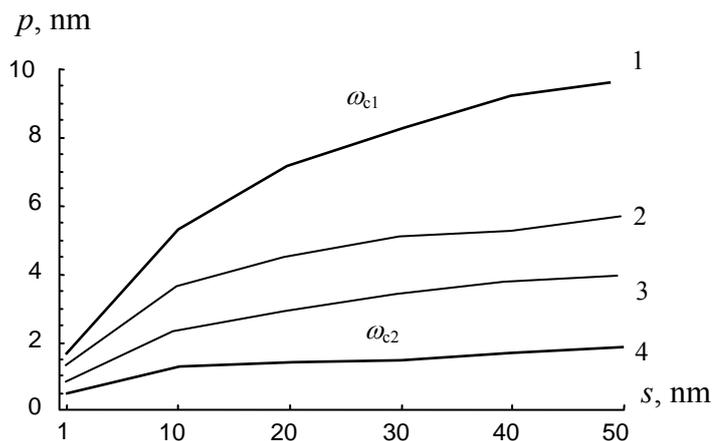


Рис. 4.6 Зависимость равновесного значения размера p_{eq} от размера s нанозерна при различных значениях мощности ω дисклинаций $\omega = 2, 7, 11$ и 14° (кривые 1, 2, 3 и 4, соответственно).

Кривые 1 и 4 на Рис. 4.6 задают нижний и верхний критические уровни мощности дисклинаций: $\omega_{c1} = 2^\circ$ и $\omega_{c2} = 14^\circ$, соответственно.

4.1.2 Влияние процесса образования новых нанозерен на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел

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 [150]. 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. 4.2)). Для расчета воспользуемся силовым критерием (например, [150]):

$$K_I(l = l_c) = K_{IC}, \quad (4.9)$$

где K_I – коэффициент интенсивности напряжений, рассчитываемый по формуле:

$$K_I(l) = \sqrt{\frac{2}{\pi l}} \int_0^l \sigma_{yy}(x, y=0) \sqrt{\frac{x}{l-x}} dx, \quad (4.10)$$

Здесь σ_{yy} – компонента тензора напряжений, создаваемых внешней нагрузкой и дефектной конфигурацией в отсутствие трещины, а K_{IC} – критическое значение коэффициента интенсивности напряжений. Для случая трещины нормального отрыва в изотропной среде имеем:

$$K_{IC} = \sqrt{\frac{4\gamma G}{1-\nu}}, \quad (4.11)$$

где γ – удельная энергия (на единицу площади) свободной поверхности трещины. Напряжение σ_{yy} , входящее в формулу (10), представимо в виде $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}^d + \sigma_0$, где σ_{yy}^d – компонента тензора напряжений, создаваемых дисклинационными диполями и дислокационными рядами AC и BD (Рис. 4.2). Выражение для компоненты σ_{yy}^d может быть получено из формул [102].

Формулы (4.9)-(4.11) позволяют численно рассчитать критическую длину l_c трещины, которая развивается в совместном поле внешнего растягивающего напряжения σ_0 и напряжений, создаваемых конфигурацией дефектов. В частном случае $\omega = 0$ (когда отсутствуют дисклинационные диполи и дислокационные ряды (Рис. 4.2)) и $\sigma_{yy}(x, y) = \sigma_0$, из формул (4.9)–(4.11), мы получаем известное выражение для критической длины $l'_c = l_c(\omega = 0)$ трещины нормального отрыва, раскрывающейся только под действием внешней растягивающей нагрузки:

$$l'_c = \frac{8G\gamma}{\pi(1-\nu)\sigma_0^2}. \quad (4.12)$$

Отношение l_c/l'_c численно описывает влияние зарождения нового нанозерна (Рис. 4.2) на рост трещины. Формирование нового нанозерна повышает трещиностойкость материала, если отношение $l_c/l'_c > 1$ и снижает трещиностойкость, если отношение $l_c/l'_c < 1$.

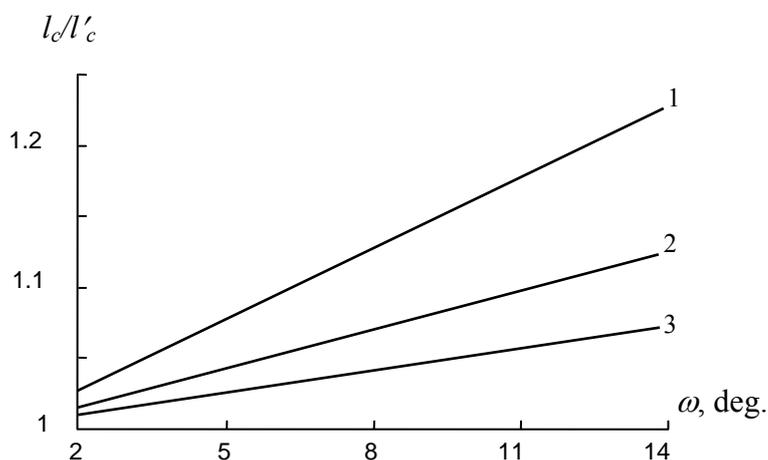


Рис. 4.7 Зависимости отношения l_c/l'_c критических длин трещины от мощности ω дисклинаций, составляющих дипольные конфигурации, при различных значениях размера нанозерна $s = 10, 20$ и 30 nm (кривые 1, 2 и 3 соответственно).

Построим зависимость l_c/l'_c от мощности ω дисклинаций, составляющих диполи (Рис. 4.2), которая варьируется в интервале $\omega_{c1} \leq \omega \leq \omega_{c2}$ (интервал, задающий мощности, при которых зарождение нанозерен энергетически выгодно), для различных значений размера s нанозерна.

Расчет проведем на примере нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, используя значения параметров, приведенных в предыдущем разделе. Из зависимостей $l_c/l'_c(\omega)$, приведенных на Рис. 4.7, видно, что критическая длина трещины растет или, другими словами, трещиностойкость нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ повышается с увеличением мощности ω дисклинаций и/или уменьшением размера s нанозерна.

4.1.3 Резюме

Таким образом, стимулированное механическим напряжением зарождение новых нанозерен и связанных с ними дисклинационных конфигураций вблизи вершин трещин (Рис. 4.2 и 4.3) является энергетически выгодным процессом в нанокристаллических материалах в широких интервалах параметров их структуры. Зарождение новых нанозерен включает расщепление границ зерен (Рис. 4.2). Следовательно, вероятность протекания таких процессов при росте трещины велика именно в нанокристаллических материалах, в которых плотность ансамбля границ зерен чрезвычайно высока. Рассматриваемый процесс приводит к частичной релаксации высоких локальных напряжений вблизи вершин трещин, что обуславливает повышение трещиностойкости нанокристаллических материалов. Как следствие, зарождение новых нанозерен вблизи вершин трещин представляет собой особый (в частности, специфический для нанокристаллических структур) микромеханизм повышения трещиностойкости нанокристаллических материалов. Отметим, что в нанокристаллических керамиках зарождение новых нанозерен, вызванное действием механических напряжений, осуществляется более эффективно, чем стимулируемый напряжением рост зерен, поскольку миграция ранее образовавшихся границ зерен в нанокерамиках часто затруднена (вследствие различия химического состава внутри зерен и в границах зерен [203]).

4.2 Зарождение цепочек наноскопических зерен в деформируемых нанокристаллических твердых телах

В недавних экспериментальных работах [199,200] был выявлен новый микромеханизм пластической деформации, а именно зарождение цепочек вытянутых нанозерен с малоугловыми и/или специальными границами зерен внутри относительно больших зерен, имеющих высокоугловые границы. Основываясь на этих экспериментальных данных, в этом разделе предлагается теоретическая модель, которая детально описывает микромеханизм зарождения цепочек вытянутых нанозерен внутри относительно больших зерен под действием внешней механической нагрузки. В рамках этой модели будет показано, что зарождение таких цепочек нанозерен энергетически выгодно вблизи сильных концентраторов напряжений (например вершин трещин) в нанокристаллических металлах и керамиках. Таким образом, основной целью настоящего раздела является рассмотрение характеристик зарождения цепочки наноскопических зерен и исследование влияния цепочек наноскопических зерен, зародившихся вблизи вершины трещины, на дальнейший рост этой трещины в нанокристаллических материалах.

4.2.1 Условия образования цепочек нанозерен в нанокристаллических твердых телах

Рассмотрим 2-мерное сечение нанокристаллического образца, который находится под действием внешней одноосной растягивающей нагрузки σ_0 . Схематическое изображение такого нанокристаллического образца дано на Рис. 4.8а. Для простоты, мы предполагаем, что структура материала не меняется вдоль оси z , которая перпендикулярна плоскости рисунка. Это предположение позволяет нам значительно упростить математический

анализ поставленной задачи, сводя задачу к рассмотрению 2-мерной структуры.

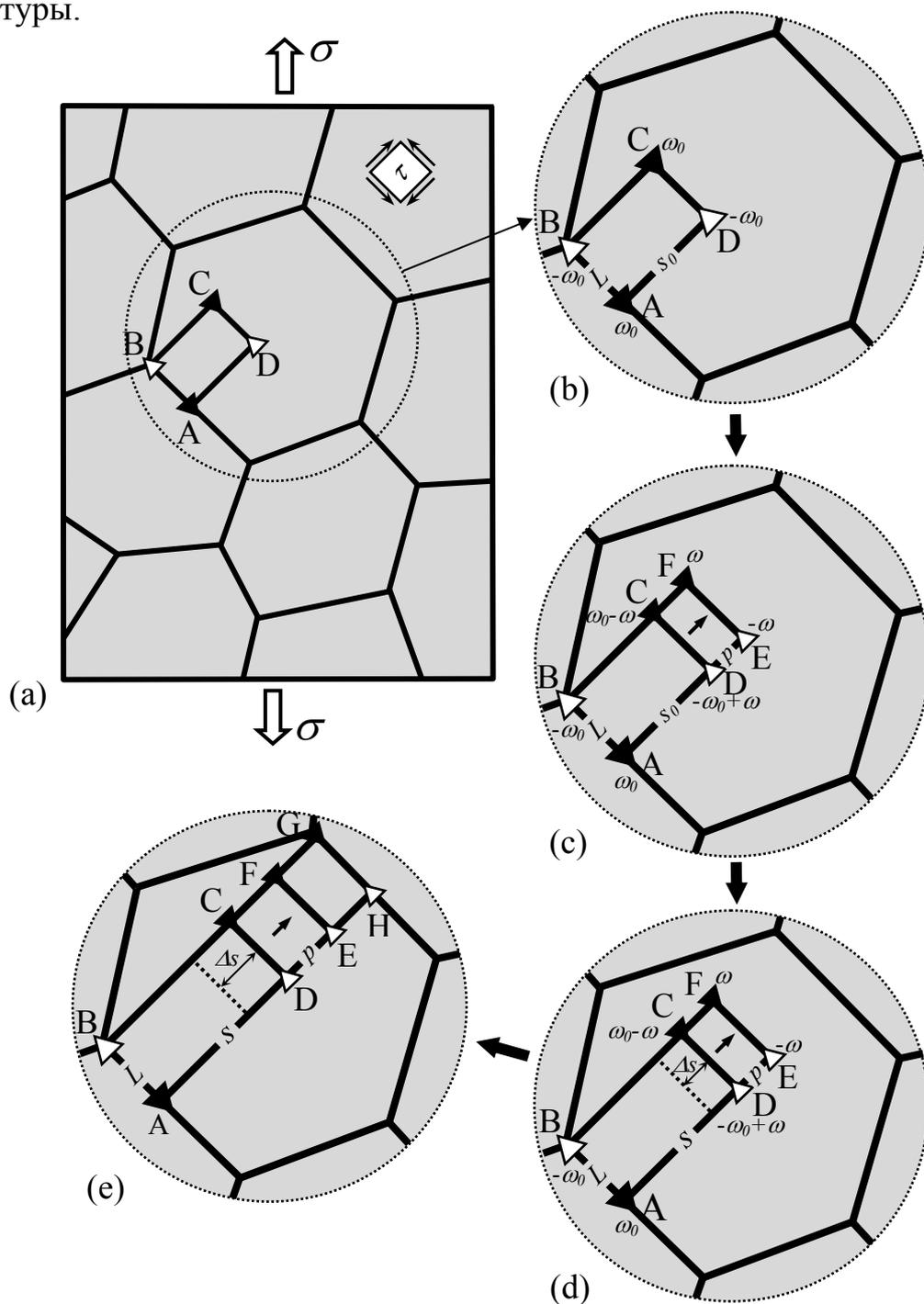


Рис. 4.8 (а) Образец с мелкозернистой структурой, содержащий трещину I типа и находящийся под действием механической нагрузки. (б) Исходное состояние с ранее образовавшемся наноскопическим зерном $ABCD$, содержащем квадруполь клиновых $\pm \omega_0$ -дислокаций. (с-d) Зарождение цепочки наноскопических зерен, состоящей из двух нанозерен $ABCD$ и $CDEF$, под действием внешней механической нагрузки. (е) Конгломерат наноскопических зерен.

В тоже время, 2-мерный случай определенно отражает все основные аспекты задачи. Также, в рамках модели нанокристаллический образец представляет собой упруго-изотропное твердое тело, которое характеризуется модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν .

Предполагается, что действие внешнего сдвигового напряжения τ может привести к зарождению нового зерна $ABCD$ наноскопического размера, моделируемого прямоугольником со сторонами L и s , которые также являются плечами квадруполя клиновых дисклинаций мощностью $\pm \omega_0$ ($\pm \omega_0$ -дисклинаций) (Рис. 4.8a,b). Процесс зарождения такого нанозерна вблизи вершины трещины детально исследован в разделе 4.1.

В рамках подхода, предложенного в разделе 4.1, зарождение второго нанозерна $CDEF$ вблизи ранее зародившегося нанозерна $ABCD$ происходит в результате расщепление границы зерна CD на неподвижную границу CD (расположенную в том же месте) и подвижную границу EF , которая мигрирует на расстояние p (Рис. 4.8c). Миграция границы EF , сопровождается образованием двух новых границ зерен CE и DF (Рис. 4.8c). Точки E и F подвижной границы EF содержат клиновые дисклинации с мощностью $\pm \omega$ ($\pm \omega$ -дисклинаций), которые образуются в результате расщепления исходных $\pm \omega_0$ -дисклинаций (рис. 4.8c). В результате расщепления границы CD и дисклинаций исходного квадруполя $ABCD$ образуется новое нанозерно $CDEF$ (рис. 4.8c).

В дальнейшем, под действием внешнего сдвигового напряжения τ может начаться миграция границы зерна AC (Рис. 4.8). В этом случае геометрия, рассматриваемой нами, цепочки нанозерен будет определяться изменяться изменением не только расстояния p , но и изменением расстояния s (Рис. 4.8b-d). В итоге, серия структурных трансформаций, представленных на Рис. 4.8b-d, может превести к образованию новых нанозерен, которые схематично изображены на Рис. 4.8e. Таким образом, цепочка нанозерен выступает в роли зародыша для образования конгломератов наноскопических зерен (групп зерен с малоугловыми и/или специальными

границами зерен внутри относительно больших зерен, имеющих высокоугловые границы), которые часто образуются в нанокристаллических и ультрамелкозернистых материалах, получаемых методами интенсивной пластической деформации [199,200].

Рассмотрим, энергетические характеристики трансформации дефектной конфигурации, представленной на Рис. 4.8b-d. Эта трансформация (Рис. 4.8b-d) характеризуется разностью энергий $\Delta W = W_2 - W_1$, где W_1 - энергия системы в исходном состоянии с диполем $\pm \omega_0$ -дисклинаций (Рис. 4.8b), а W_2 - энергия дефектной системы в конечном состоянии (Рис. 4.8d). Предложенная трансформация энергетически выгодна при выполнении условия $\Delta W < 0$. В терминах теории дефектов разность энергий ΔW может быть записана следующим образом:

$$\Delta W = E_s^{\omega_0} + E_s^{\omega} + E_s^{\omega_0-\omega} + E_{\text{int}}^{\omega_0-\omega} + E_{\text{int}}^{\omega_0-(\omega_0-\omega)} + E_{\text{int}}^{\omega-(\omega_0-\omega)} + E_\gamma - E_\tau - E_s^q, \quad (4.13)$$

где $E_s^{\omega_0}$, E_s^{ω} , $E_s^{\omega_0-\omega}$ и E_s^q - собственные упругие энергии диполя $AB \pm \omega_0$ -дисклинаций, диполя $EF \pm \omega$ -дисклинаций, диполя $CD \pm (\omega_0 - \omega)$ -дисклинаций и исходного квадруполя $ABCD \pm \omega_0$ -дисклинаций, соответственно; $E_{\text{int}}^{\omega_0-\omega}$ - энергия упругого взаимодействия между диполем $AB \pm \omega_0$ -дисклинаций и диполем $EF \pm \omega$ -дисклинаций; $E_{\text{int}}^{\omega_0-(\omega_0-\omega)}$ - энергия упругого взаимодействия между диполем $AB \pm \omega_0$ -дисклинаций и диполем $CD \pm (\omega_0 - \omega)$ -дисклинаций; $E_{\text{int}}^{\omega-(\omega_0-\omega)}$ - энергия упругого взаимодействия между диполем $EF \pm \omega$ -дисклинаций и диполем $CD \pm (\omega_0 - \omega)$ -дисклинаций; E_γ - удельная энергия новых границ зерен CE , DF и EF ; E_τ - работа внешнего сдвигового напряжения τ по перемещению дисклинационных диполей CD and EF (Рис. 4.8d).

Собственные энергии $E_s^{\omega_0}$, E_s^{ω} , $E_s^{\omega_0-\omega}$ и E_s^q даются следующими формулами [102]:

$$E_s^{\omega_0} = \frac{D\omega_0^2 L^2}{2} \left(\ln \frac{R}{L} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.14)$$

$$E_s^\omega = \frac{D\omega^2 L^2}{2} \left(\ln \frac{R}{L} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.15)$$

$$E_s^{\omega_0 - \omega} = \frac{D(\omega_0 - \omega)^2 L^2}{2} \left(\ln \frac{R}{L} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.16)$$

$$E_s^q = \frac{D\omega_0^2}{2} \left(L^2 \ln \frac{L^2 + s^2}{L^2} + s^2 \ln \frac{L^2 + s^2}{s^2} \right), \quad (4.17)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, и R - радиусэкранирования дальнедействующих полей дисклинаций.

Используя результаты работы [201], выражения для энергий взаимодействия $E_{\text{int}}^{\omega_0 - \omega}$, $E_{\text{int}}^{\omega_0 - (\omega_0 - \omega)}$ и $E_{\text{int}}^{\omega - (\omega_0 - \omega)}$ записываются в следующем виде:

$$E_{\text{int}}^{\omega_0 - \omega} = -\frac{D\omega_0\omega}{2} \left(L^2 + L^2 \ln \frac{R^2}{L^2 + (s+p)^2} - (s+p)^2 \ln \frac{L^2 + (s+p)^2}{(s+p)^2} \right), \quad (4.18)$$

$$E_{\text{int}}^{\omega_0 - (\omega_0 - \omega)} = -\frac{D\omega_0(\omega_0 - \omega)}{2} \left(L^2 + L^2 \ln \frac{R^2}{L^2 + s^2} - s^2 \ln \frac{L^2 + s^2}{s^2} \right), \quad (4.19)$$

$$E_{\text{int}}^{\omega - (\omega_0 - \omega)} = \frac{D\omega(\omega_0 - \omega)}{2} \left(L^2 + L^2 \ln \frac{R^2}{L^2 + p^2} - p^2 \ln \frac{L^2 + p^2}{p^2} \right). \quad (4.20)$$

Удельная энергия E_γ границ зерен CE , DF и EF очевидно дается формулой:

$$E_\gamma = (2(p + \Delta s) + L)\gamma_{gb}, \quad (4.21)$$

где $\Delta s = s - s_0$.

Работа E_τ внешнего сдвигового напряжения τ по перемещению дисклинационных диполей CD и EF на расстояния Δs и $p + \Delta s$, соответственно (см. Рис. 4.8d) дается выражением:

$$E_\tau = (\omega_0 \Delta s + \omega p)L\tau. \quad (4.22)$$

С помощью формул (4.13)-(4.22) составим выражение для полной разности энергий ΔW :

$$\begin{aligned} \Delta W = & \frac{D\omega^2}{2} \left(L^2 \ln \frac{L^2 + p^2}{L^2} + p^2 \ln \frac{L^2 + p^2}{p^2} \right) + \frac{D\omega_0\omega}{2} \left(L^2 \ln \frac{L^2}{L^2 + s^2} \right. \\ & \left. + L^2 \ln \frac{L^2 + (s+p)^2}{L^2 + p^2} + (s+p)^2 \ln \frac{L^2 + (s+p)^2}{(s+p)^2} - s^2 \ln \frac{L^2 + s^2}{s^2} - p^2 \ln \frac{L^2 + p^2}{p^2} \right) - \\ & (\omega_0\Delta s + \omega p)L\tau + (2(p + \Delta s) + L)\gamma_{gb}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Проведем анализ, полученного для разности энергий ΔW выражения. Построим карту уровней разности энергий ΔW в зависимости от размера s исходного квадруполя $\pm \omega_0$ -дисклинаций и мощности ω подвижного диполя $\pm \omega$ -дисклинаций на примере нанокристаллической керамики α -Al₂O₃ (сапфир) и нанокристаллического Al (алюминий). В наших вычислениях используем следующие параметры [91,207]: $G = 169$ GPa и $\nu = 0.23$ для α -Al₂O₃; и $G = 26.5$ GPa и $\nu = 0.34$ для Al. Величину γ_{gb} удельной энергии специальных границ в α -Al₂O₃ и Al возьмем следующей: $\gamma_{gb}^{Al_2O_3} = 0.05$ J/m² [206] и $\gamma_{gb}^{Al} = 0.1$ J/m² [208,209]. Плечо и мощность исходного диполя $\pm \omega_0$ -дисклинаций AB (Рис. 4.8b) выберем равной $L = 10$ nm и $\omega_0 = 30^\circ$, соответственно. Расчет зависимостей $\Delta W(\omega, s)$ (в единицах [eV/nm²]) представлен на Рис. 4.9 при значениях внешнего сдвигового напряжения $\tau = 1$ GPa и расстояния $p = 1$ nm, соответствующего началу процесса расщепления границы зерна CD (Рис. 4.8 b и c).

Из зависимостей на Рис. 4.9 следует, что процесс расщепления границы зерна CD энергетически выгоден, 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 -Al₂O₃ (Рис. 4.9a); и $s = s_0 \approx 31$ nm при $\omega = \omega' \approx 14^\circ$, для Al (Рис. 4.9b).

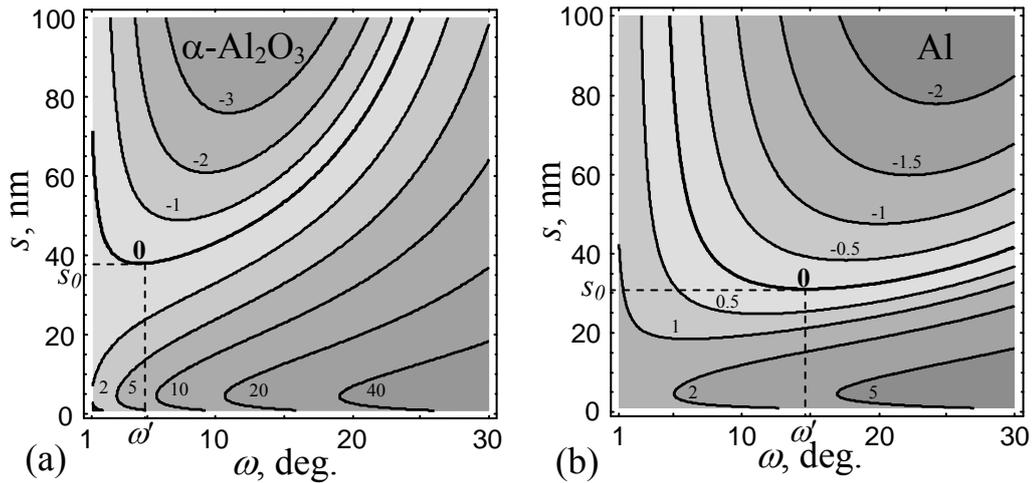


Рис. 4.9 Карта уровней разности энергий ΔW в координатном пространстве s и ω при значении $\tau = 1$ GPa для (a) нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (сапфир) и (b) нанокристаллического Al (алюминий).

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 (Рис. 4.9).

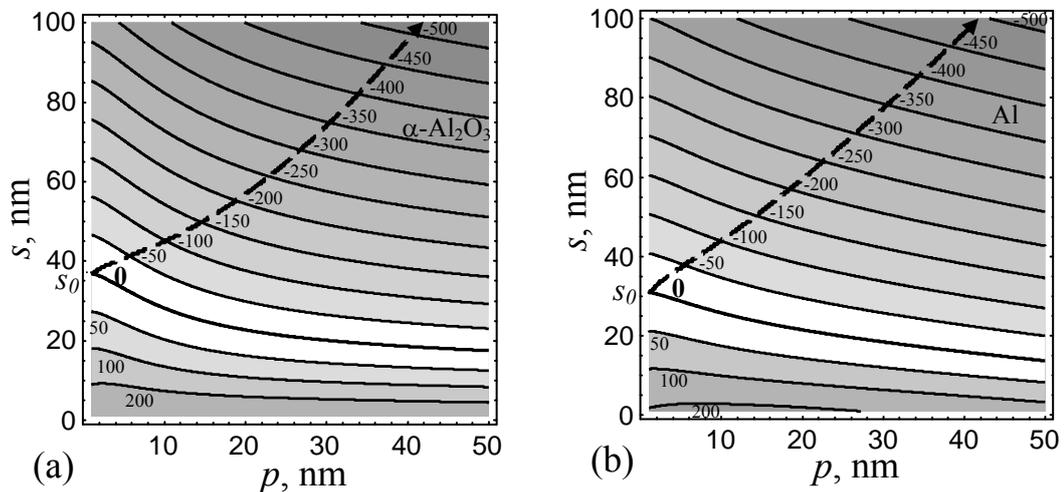


Рис. 4.10 Карта уровней разности энергий ΔW в координатном пространстве s и p для случая (a) нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (сапфир) при $\omega \approx 5^\circ$ и (b) нанокристаллического Al при $\omega \approx 14^\circ$ (алюминий).

Далее, построим карту уровней разности энергий $\Delta W(p, s)$ в зависимости от расстояний p и s при $\omega = 5^\circ$ и $s = s_0 = 37$ nm в случае $\alpha\text{-}$

Al_2O_3 (Рис. 4.10а), и при $\omega = 14^\circ$ и $s = s_0 = 31 \text{ nm}$ в случае Al (Рис. 4.10b). Другие параметры дефектной системы брались такими же, как в предыдущем случае (Рис. 4.9). Пунктирная кривая на Рис. 4.10 а и б показывает направление эволюции рассматриваемой нами структуры (Рис. 4.8b-d), которое характеризуется наибольшим энергетическим выигрышем. Как следует из зависимостей на Рис. 4.10 рост размера s исходного нанозерна $ABCD$ инициирует увеличение размера p нового нанозерна $CDEF$.

4.2.2 Влияние процесса образования цепочек нанозерен на трещиностойкость нанокристаллических твердых тел

Рассмотрим, какое влияние оказывает зарождение простейшей цепочки наноскопических зерен, состоящей из двух нанозерен $ABCD$ и $CDEF$ (Рис. 4.11), вблизи вершины трещины на дальнейшее развитие этой трещины в нанокристаллическом материале.

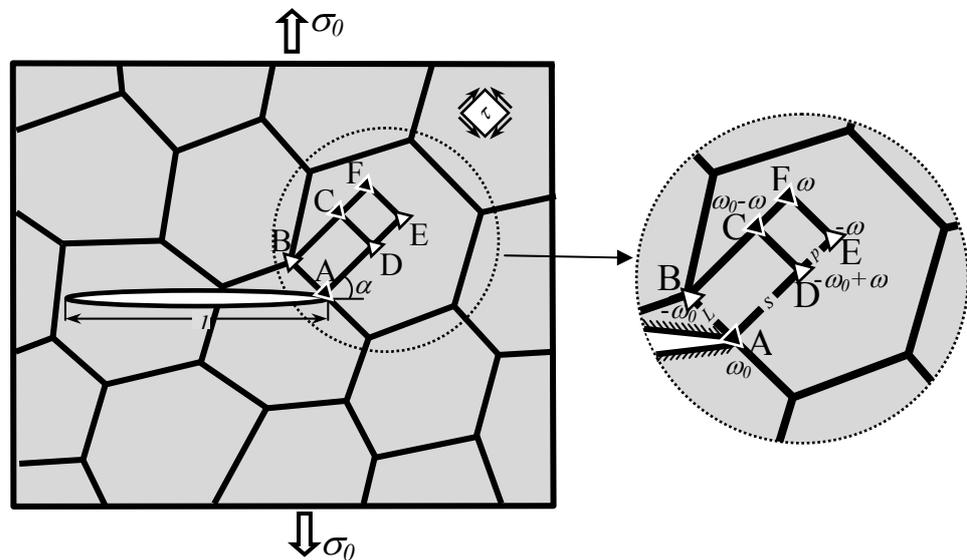


Рис. 4.11 Образец с мелкозернистой структурой, находящийся под действием механической нагрузки, содержащий трещину I типа и цепочку наноскопических зерен, которая состоит из двух нанозерен $ABCD$ и $CDEF$, зародившихся вблизи вершины трещины.

Трещина в твердом теле характеризуется критической длиной (длиной Гриффитса), определяемой как минимальная длина, при которой начинается

катастрофический рост трещины при заданном уровне напряжений [150]. 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 три диполя клиновых дисклинаций AB , CD и EF (Рис. 4.11)), сформировавшейся в результате зарождения цепочки из нанозерен $ABCD$ и $CDEF$. Для расчета воспользуемся силовым критерием (например, [150]):

$$K_I(l = l_c) = K_{IC}, \quad (4.24)$$

где K_I – коэффициент интенсивности напряжений, рассчитываемый по формуле:

$$K_I(l) = \sqrt{\frac{2}{\pi l}} \int_0^l \sigma_{yy}(x, y=0) \sqrt{\frac{x}{l-x}} dx, \quad (4.25)$$

Здесь σ_{yy} – компонента тензора напряжений, создаваемых внешней нагрузкой и дефектной конфигурацией в отсутствие трещины, а K_{IC} – критическое значение коэффициента интенсивности напряжений. Для случая трещины нормального отрыва в изотропной среде имеем:

$$K_{IC} = \sqrt{\frac{4\gamma G}{1-\nu}}, \quad (4.26)$$

где γ – удельная энергия (на единицу площади) свободной поверхности трещины. Напряжение σ_{yy} , входящее в формулу (4.25), представимо в виде $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}^d + \sigma_0$, где σ_{yy}^d – компонента тензора напряжений, создаваемых дисклинационными диполями AB , CD и EF (Рис. 4.11). Выражение для компоненты σ_{yy}^d может быть получено из формул [102].

Формулы (4.24)-(4.26) позволяют численно рассчитать критическую длину l_c трещины, которая развивается в совместном поле внешнего растягивающего напряжения σ_0 и напряжений, создаваемых конфигурацией

дефектов. В частном случае $\omega_0 = 0$ (то есть, когда отсутствуют дисклинационные диполи AB , CD и EF) и $\sigma_{yy}(x, y) = \sigma_0$, из формул (4.24)-(4.26), мы получаем известное выражение для критической длины $l'_c = l_c(\omega = 0)$ трещины нормального отрыва, раскрывающейся только под действием внешней растягивающей нагрузки, которое дается формулой (4.12) из предыдущего раздела.

Отношение l_c/l'_c численно описывает влияние зарождения цепочки из двух нанозерен $ABCD$ и $CDEF$ (Рис. 4.11) на рост трещины. Формирование новых нанозерен повышает трещиностойкость материала, если отношение $l_c/l'_c > 1$ и снижает трещиностойкость, если отношение $l_c/l'_c < 1$. Построим зависимость l_c/l'_c от мощности ω дисклинаций, составляющих подвижный дисклинационный диполь EF , для различных значений расстояния p (Рис. 4.10).

Расчет проведем на примере нанокристаллической керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. В расчетах, будем использовать следующие значения параметров для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ [204,206]: $G = 169$ ГПа, $\nu = 0.23$, $\gamma = 1,5$ Дж/м², $\gamma_b = 0,5$ Дж/м². Внешнее напряжение σ_0 положим равным 1 ГПа, что характерно для большинства нанокристаллических керамик. Параметры дефектной структуры: размер s зерна $ABCD$, мощность ω_0 и плечо L диполя AB , угол α , задающий направление зарождения цепочки нанозерен относительно плоскости трещины (Рис. 4.11), выберем такими же, как в модели, зарождения цепочки нанозерен (см. раздел 4.2.1). Таким образом, эти параметры имеют следующие значения: $s = 30$ нм, $\omega_0 = 30^\circ$, $L = 10$ нм $\alpha = 70^\circ$.

Расчет зависимостей $l_c/l'_c(p, \omega)$ представлен на Рис. 4.12. Из зависимостей $l_c/l'_c(p, \omega)$ видно, что критическая длина трещины растет с уменьшением размера p нанозерна $CDEF$ и с увеличением мощности ω дисклинаций, которые задают разориентировку границы зерна EF .

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 30nm соответственно. Тогда, как при 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 30nm соответственно.

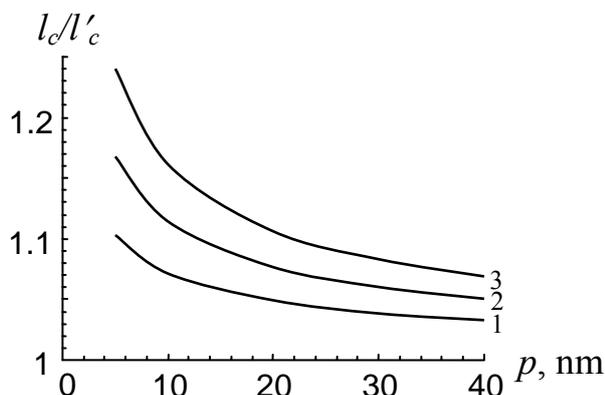


Рис. 4.12 Зависимости отношения l_c/l'_c критических длин трещины от размера p нанозерна $CDEF$ при различных значениях мощности дисклинаций $\omega = 10^\circ, 15^\circ$ и 20° (кривые 1, 2 и 3 соответственно).

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%.

4.2.3 Резюме

Из полученных результатов следует, что зарождение цепочки из двух наноскопических зерен вблизи вершины трещины приводит к торможению роста трещины в нанокристаллической керамике $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. 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 материалов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получены следующие **основные результаты**:

1. Впервые построена модель механизма совместного действия межзеренного скольжения и ротационной деформации, инициирующего вращение кристаллической решетки в нанозернах с размером ниже 20 нанометров. Определены условия перехода от межзеренного скольжения к ротационной деформации.
2. Разработана модель нового механизма аккомодации межзеренного скольжения за счет эмиссии частичных дислокаций из границ зерен, препятствующего зарождению нанотрещин в нанокристаллических твердых телах. Проведен анализ конкуренции между зарождением нанотрещин и испусканием частичных дислокаций из границ зерен.
3. Впервые дано теоретическое объяснение необычных эффектов упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических твердых телах при сверхпластической деформации, а также построена теоретическая зависимость напряжения течения от степени пластической деформации, подтверждаемая экспериментальными данными.
4. Построены модели новых механизмов зарождения деформационных нанодвойников на границах зерен и вблизи вершин трещин в нанокристаллических твердых телах за счет последовательного испускания частичных дислокаций из границ зерен и осуществления идеальных наноскопических сдвигов. Показано, что зарождение таких нанодвойниковых прослоек вблизи вершин трещин способно в несколько раз повышать трещиностойкость хрупких нанокристаллических материалов.

5. Впервые построены модели новых специфических механизмов релаксации напряжений в нанокристаллических пленках и подложках за счет действия межзеренного скольжения и диффузии по границам зерен, действие которых эффективно снижает внутренние напряжения, возникающие в системах пленка-подложка.

6. Впервые разработаны модели специфических механизмов зарождения новых наноскопических зерен и их цепочек вблизи вершин трещин за счет расщепления и миграции границ зерен, а также исследовано влияние образования и эволюции таких нанозерен на трещиностойкость хрупких нанокристаллических твердых тел. Показано, что реализация этих специфических механизмов пластичности способствует частичной релаксации высоких локальных напряжений вблизи вершин трещин в хрупких нанокристаллических материалах.

Полученные результаты достоверно описывают существующие экспериментальные данные, являются новыми и важными для физико-математической отрасли науки, как с точки зрения понимания фундаментальных основ пластического и сверхпластического поведения нанокристаллических металлов и сплавов, так и практических задач получения и контроля высоких механических характеристик нанокристаллических материалов, демонстрирующих пластичность и сверхпластичность.

На основании полученных результатов сформулированы следующие **основные выводы:**

1. Межзеренное скольжение эффективно переходит в ротационную деформацию на тройных стыках границ зерен с большими углами раствора в

нанокристаллических твердых телах. Переход от межзеренного скольжения к вращению зерен возможен только для нанозерен с размером ниже 20nm;

2. Эффективным механизмом упрочнения в нанокристаллических твердых телах при сверхпластической деформации является накопление разностных дислокаций в тройных стыках границ зерен, происходящее за счет зернограничного скольжения. Эффективными механизмами разупрочнения в нанокристаллических твердых телах при сверхпластической деформации являются локальная миграция тройных стыков и испускание решеточных дислокаций из тройных стыков в прилегающие нанозерна;
3. Испускание частичных дислокаций из границ зерен может служить эффективным механизмом релаксации упругих напряжений, создаваемых зернограничными дисклинациями при межзеренном скольжении, препятствуя зарождению нанотрещин и, следовательно, повышает пластические свойства деформируемых нанокристаллических твердых тел;
4. Последовательное испускание частичных дислокаций из границ зерен в поле сдвиговых напряжений дисклинационных диполей и вблизи вершин трещин обеспечивает зарождение достаточно толстых нанодвойниковых прослоек в нанокристаллических твердых телах. Зарождение нанодвойников за счет наноскопических идеальных сдвигов эффективно реализуется вблизи вершин трещин в нанокристаллических материалах. Зарождение и эволюция нанодвойников вблизи вершин трещин является эффективным механизмом повышения трещиностойкости нанокристаллических твердых тел;
5. Образование диполей зернограничных дисклинаций (ротационных дефектов) при межзеренном скольжении служит эффективным механизмом релаксации внутренних напряжений в нанокристаллических пленках и покрытиях. Также, ускоренный диффузионный массоперенос по границам

зерен способен в разы снижать напряжения несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Снижение внутренних напряжений уменьшает вероятность зарождения трещин, повышая трещиностойкость нанокристаллических пленок и покрытий;

6. Расщепление и последующая миграция наноскопических границ зерен под действием высоких сдвиговых напряжений вблизи вершин трещин приводит к зарождению наноскопических зерен и их цепочек. Зарождения наноскопических зерен приводит к частичной релаксации высоких локальных напряжений вблизи вершин трещин, что обуславливает увеличение трещиностойкости нанокристаллических керамик и металлов.

Таким образом, диссертация отвечает на все вопросы поставленных во введении научных задач и является единым, внутренне непротиворечивым крупным научным достижением в физико-математической отрасли науки, что подтверждается наличием большой теоретической базы, строгим идейным соответствием, а также концептуальностью и взаимосвязностью выводов.

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).

ЛИТЕРАТУРА

Л.1 Список цитируемой литературы

- [1] H. Gleiter. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure // Acta Mater. **48**, 1, 1-29 (2000).
- [2] R.W. Siegel. Nanostructured materials – mind over matter // Nanostructured Materials **4**, 1, 121-138 (1994).
- [3] V.G. Gryaznov, L.I. Trusov. Size effect in micromechanics of nanocrystals // Progress in Material Science **37**, 4, 1993, 290-400 (1993).
- [4] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials. Springer, Berlin, 2004, 181 с.
- [5] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Физическая механика деформируемых наноструктур. Том 1. Янус, Санкт-Петербург, 2003, 194 с.
- [6] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Дефекты и механизмы пластичности в наноструктурных и некристаллических материалах. Янус, Санкт-Петербург, 2001, 180 с.
- [7] Р.З. Валиев, И.В. Александров. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. М., Логос, 2000, 272 с.
- [8] А.И. Гусев, А.А. Ремпель. Нанокристаллические материалы. М., Физматлит, 2000, 224 с.
- [9] Р.А. Андриевский, А.М. Глезер. Размерные эффекты в нанокристаллических материалах. I. Особенности структуры. Термодинамика. Фазовые равновесия. Кинетические явления // ФММ **88**, 1, 45-67 (1999).
- [10] Р.А. Андриевский, А.М. Глезер. Размерные эффекты в нанокристаллических материалах. II. Механические и физические свойства // ФММ **89**, 1, 83-91 (2000).
- [11] H. Gleiter. Nanocrystalline materials // Progr. Mater. Sci. **33**, 4, 223-315 (1989).

- [12] H. Birringer, H. Gleiter. Nanocrystalline materials // in: Advances in Materials Science, Encyclopedia of Materials Science and Engineering. Ed. R.W.Cahn. Oxford, Pergamon Press, Vol. 1, 1988, p. 339-349.
- [13] H. Gleiter. Materials with ultrafine microstructures: retrospective and perspective // Nanostructured Materials **1**, 1, 1-19 (1992).
- [14] C.C. Koch, D.G. Moris, K. Lu, A. Inoue. Mechanical behavior of nanostructured materials // MRS Bulletin **24**, 2, 14-58 (1999).
- [15] K.A. Padmanabhan. Mechanical properties of nanostructured materials // Mater. Sci. Eng. A **304-306**, 200-205 (2000).
- [16] U. Erb, A.M. El-Sherik, G. Palumbo, K.T. Aust. Synthesis, structure and properties of electroplated nanocrystalline materials // Nanostructured Materials **2**, 4, 383-390 (1993).
- [17] R.W. Siegel. Synthesis and properties of nanophase materials // Mater. Sci. Eng. A **168**, 2, 189-197 (1993).
- [18] Н.И. Носкова. Свойства нанокристаллических многофазных сплавов // Современные вопросы физики и механики материалов, СПб, 1997, с. 333-349.
- [19] А.И. Гусев. Эффекты нанокристаллического состояния в компактных металлах и соединениях // УФН **168**, 1, 55-68 (1998).
- [20] A.A. Nazarov, A.E. Romanov, R.Z. Valiev. Models of the defect structure and analysis of the mechanical behavior of nanocrystals // Nanostruct. Mater. **6**, 5-8, 775-778 (1995).
- [21] J. Eckert, A. Reiger-Leonhard, B. Weiss, M. Heilmaier, L. Schultz. Bulk nanostructured multicomponent alloys // Adv. Eng. Mater. **3**, 1-2, 41-47 (2001).
- [22] T. Volpp, E. Goring, W.-M. Kuschke, E. Arzt. Grain size determination and limits to Hall-Petch behavior in nanocrystalline NiAl powders // Nanostructured Materials **8**, 7, 855-865 (1997).
- [23] K.S. Kumar, H. Swygenhoven, S. Suresh. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys // Acta Mater. **51**, 19, 5743-5774 (2003).

- [24] C. Suryanarayana. Nanocrystalline materials // *Inter. Mater. Rev.* **40**, 2, 41-64 (1995).
- [25] H.S. Kim. A composite model for mechanical properties of nanocrystalline materials // *Scr. Mater.* **39**, 8, 1057-1061 (1998).
- [26] J. Schiotz, T. Vegge, F.D. Di Tolla, K.W. Jacobsen. Atomic-scale simulations of the mechanical deformation of nanocrystalline metals // *Phys. Rev. B* **60**, 17, 11971-11983 (1999).
- [27] H. van Swygenhoven, M. Spavzer, A. Caro, D. Farkas. Competing plastic deformation mechanisms in nanophase metals // *Phys. Rev. B* **60**, 1, 22-25 (1999).
- [28] Г.А. Малыгин. Анализ параметров субмикронной дислокационной структуры в металлах при больших пластических деформациях // *ФТТ* **46**, 11, 1968-1974 (2004).
- [29] Г.А. Малыгин. Механизм образования деформационных ступенек нанометрических размеров на поверхности пластически деформируемых кристаллов // *ФТТ* **43**, 2, 248-253 (2001).
- [30] Г.А. Малыгин. Нарушение закона Хола-Петча в микро- и нанокристаллических материалах // *ФТТ* **37**, 8, 2281-2292 (1995).
- [31] K. Lu, M.L. Sui. An explanation to the abnormal Hall-Petch relation in nanocrystalline materials // *Scr. Metall. Mater.* **28**, 12, 1465-1470 (1993).
- [32] H.W. Song, S.R. Guo, Z.Q. Hu. A coherent polycrystal model for the inverse Hall-Petch relation in nanocrystalline materials // *Nanostruct. Mater.* **11**, 2, 203-210 (1999).
- [33] A.H. Chokshi, A. Rosen, J. Karch, H. Gleiter. On the validity of the Hall-Petch relationship in nanocrystalline materials // *Scr. Metall.* **23**, 10, 1679-1684 (1989).
- [34] Q. Wei, D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma. Evolution and microstructure of shear bands in nanostructured Fe // *Appl. Phys. Lett.* **81**, 7, 1240-1242 (2002).

- [35] D. Jia, K.T. Ramesh KT, E. Ma. Effects of nanocrystalline and ultrafine grain sizes on constitutive behavior and shear bands in iron // *Acta Mater.* **51**, 12, 3495-3509 (2003).
- [36] I.A. Ovid'ko. Deformation of nanostructures // *Science* **295**, 5564, 2386-2386 (2002).
- [37] S.X. McFadden, R.S Mishra, R.Z. Valiev, A.P. Zhilyaev, A.K. Mukherjee. Low-temperature superplasticity in nanostructured nickel and metal alloy // *Nature*, **398**, 6729, 684-686 (1999).
- [38] G. He, J. Eckert, W. Loser, L. Schultz. Novel Ti-base nanostructure – dendrite composite with enhanced plasticity // *Nature Materials* **2**, 1, 33-37 (2003).
- [39] Y. Wang, M. Chen, F. Zhou, E. Ma. High tensile ductility in a nanostructured materials // *Nature* **419**, 6910, 912-915 (2002)
- [40] R.S. Mishra, V.V. Stolyarov, C. Echer, R.Z. Valiev and A.K. Mukherjee. Mechanical behavior and superplasticity of a severe plastic deformation processed nanocrystalline Ti–6Al–4V alloy // *Mater. Sci. Eng. A* **298**, 1-2, 44-50 (2001).
- [41] R.K. Islamgaliev, R.Z. Valiev, R.S. Mishra and A.K. Mukherjee. Enhanced superplastic properties in bulk metastable nanostructured alloys // *Mater. Sci. Eng. A* **304-306**, 1-2, 206-210 (2001).
- [42] R.S Mishra, R.Z. Valiev, S.X. McFadden, R.K. Islamgaliev, A.K. Mukherjee. High-strain-rate superplasticity from nanocrystalline Al alloy 1420 at low temperatures // *Phil. Mag. A* **81**, 1, 37-48 (2001).
- [43] R.Z. Valiev, C. Song, S.X. McFadden, A.K. Mukherjee, R.S Mishra. TEM/HREM observations of nanostructured superplastic Ni₃Al // *Phil. Mag. A* **81**, 1, 25-36 (2001).
- [44] A.K. Mukherjee. An examination of the constitutive equation for elevated temperature plasticity // *Mater. Sci. Eng. A* **322**, 1-2, 1-22 (2002).

- [45] K.A. Padmanabhan and H. Gleiter. Optimal structural superplasticity in metals and ceramics of microcrystalline- and nanocrystalline-grain sizes // *Mater. Sci. Eng. A* **381**, 1-2, 28-38 (2004).
- [46] A.E. Romanov. Micromechanics of defects in nanostructured materials // in: *Nanostructured Materials: Science and Technology*. Eds. G.-M.Chow, N.I.Noskova, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London, 1998, p. 207-242.
- [47] В.Г. Грязнов, А.М. Капрелов, А.Е. Романов. О критической устойчивости дислокаций в микрокристаллах // *Письма в ЖТФ* **15**, 2, 39-44 (1989).
- [48] V.G. Gryaznov, A.M. Kaprelov, A.E. Romanov. Size effects of dislocation stability in small particles and microcrystallinities // *Scr. Metall.* **23**, 8, 1443-1448 (1989).
- [49] V.G. Gryaznov, I.A. Polonsky, A.E. Romanov, L.I. Trusov. Size effects of dislocation stability in nanocrystals // *Phys. Rev. B* **44**, 1, 42-46 (1991).
- [50] A.E. Romanov. Continuum theory of defects in nanoscaled materials // *Nanostruct. Mater.* **6**, 1-4, 125-134 (1995).
- [51] M. Ke, W.W. Milligan, S.A. Hackney, J.E. Carsley, E.C. Aifantis. HREM study of fracture and deformation behavior of nanostructured thin films // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **308**, 4, 565-569 (1993).
- [52] M. Ke, W.W. Milligan, S.A. Hackney, J.E. Carsley, E.C. Aifantis. Observation and measurement of grain rotation and plastic strain in nanostructured metal thin films // *Nanostruct. Mater.* **5**, 6, 689-697 (1995).
- [53] D.H. Ping, T.S. Xie, D.X. Li, H.Q. Ye. High resolution transmission electron microscopy studies of the microstructure of nanocrystalline $Ti_{70}Ni_{20}Si_{10}$ alloy // *Nanostruct. Mater.* **5**, 4, 457-464 (1995).
- [54] R.W. Siegel, G.E. Fougere. Mechanical properties of nanophasemetals // *Nanostruct. Mater.* **6**, 1-4, 205-216 (1995).

- [55] R.W. Siegel. Nanophase materials // *Encycl. of Appl. Physics*, Ed. G.L.Trigg, Weinheim, VCH, Vol. 11, 1994, p. 173-200.
- [56] D.A. Konstantinidis, E.C. Aifantis. On the “anomalous” hardness of nanocrystalline materials // *Nanostruct. Mater.* **10**, 7, 1111-1118 (1998).
- [57] H. Hahn, P. Mondal, K.A. Padmanabhan. Plastic deformation of nanocrystalline materials // *Nanostruct. Mater.* **9**, 1/8, 603-606 (1997).
- [58] H. Hahn, K.A. Padmanabhan. A model for the deformation of nanocrystalline materials // *Philos. Mag. B* **76**, 4, 559-571 (1997).
- [59] A.A Fedorov, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Transformations of grain boundary dislocation pile-ups in nano- and polycrystalline materials // *Acta Mater.* **51**, 4, 887-898 (2003).
- [60] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter. Dislocation processes in the deformation of nanocrystalline aluminium by molecular dynamics simulation // *Nature Materials* **1**, 1, 45-48 (2002).
- [61] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, C.S. Pande. Yield stress of nanocrystalline materials: Role of grain boundary dislocations, triple junctions and Coble creep // *Phil. Mag.* **84**, 9, 847-863 (2003).
- [62] M. Murayama, J.M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki. Atomic-level observation of disclination dipoles in mechanically milled nanocrystalline Fe // *Science* **295**, 5564, 2433-2435 (2002).
- [63] Г.А. Малыгин. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов // *ФТТ* **49**, 6, 961-982 (2007).
- [64] Н.И. Носкова, Е.Г. Волкова. Исследование деформации методом *in situ* нанокристаллической меди // *ФММ* **91**, 6, 100-107 (2001).
- [65] Н.И. Носкова. Физика деформации нанокристаллических металлов и сплавов // *Проблемы нанокристаллических материалов*, под редакцией В.В. Устинова и Н.И. Носковой, УрО РАН, Екатеринбург, 2002, с. 157-170.

- [66] Н.И. Носкова, Р.Р. Мулюков. Субмикроструктурные и нанокристаллические металлы и сплавы. УрО РАН, Екатеринбург, 2003, 279 с.
- [67] Н.И. Носкова, Е.Г. Волкова. Исследование деформации методом *in situ* нанокристаллического сплава $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ // ФММ **92**, 4, 107-111 (2001).
- [68] Н.И. Носкова, О.А. Елкина, В.В. Столяров, И.А. Перетрунина. Упрочнение и структура нанокристаллического титана // ФММ **97**, 5, 131-135 (2003).
- [69] Z. Shan, E.A. Stoch, J.M.K. Wiezorek, J.A. Knapp, D.M. Follstaedt, S.X. Mao. Grain boundary-mediated plasticity in nanocrystalline nickel // Science **305**, 5684, 654-657 (2004).
- [70] K.E. Harris, V.V. Singh, A.H. King. Grain rotation in thin films of gold // Acta Mater. **46**, 8, 2623-2633 (1998).
- [71] H.-E. Schaefer, H. Wurschum, T. Gessmann, G. Stockl, P. Scharwaechter, W. Frank, R.Z. Valiev, H.-J. Fecht., C. Moelle. Diffusion and free volumes in nanocrystalline Pd. // Nanostruct. Mater. **6**, 5-8, 869-872 (1995).
- [72] Yu.R. Kolobov, G.P. Grabovetskaya, I.V. Ratochka, K.V. Ivanov. Diffusion-induced creep of polycrystalline and nanostructured metals. // Nanostruct. Mater. **12**, 5-8, 1127-1130 (1999).
- [73] R.A. Masumura, P.M. Hazzledine, C.S. Pande. Yield stress of fine grained materials // Acta Mater. **46**, 13, 4527-4534 (1998).
- [74] H.S. Kim, Y. Estrin, M.B. Bush. Plastic deformation behaviour of finegrained materials // Acta Mater. **48**, 2, 493-504 (2000).
- [75] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot S.R., H. Gleiter. Grain-boundary diffusion creep in nanocrystalline palladium by molecular-dynamics simulation// Acta Mater. **50**, 1, 61-73 (2002).
- [76] Ю.Р. Колобов, Р.З. Валиев, Г.П. Грабовецкая. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов. Наука, Новосибирск, 2001, 232 с.

- [77] F.A. Mohamed and Y. Li. Creep and superplasticity in nanocrystalline materials: current understanding and future prospects // *Mater. Sci. Eng. A* **298**, 1-2, 1-15 (2001).
- [78] A.A. Fedorov, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Triple junction diffusion and plastic flow in fine-grained materials // *Scr. Mater.* **47**, 1, 51-55 (2002).
- [79] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang. Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel // *Acta Mater.* **51**, 2, 387-405 (2003).
- [80] V. Yamakov, D. Wolf, M. Salazar, S.R. Phillpot, H. Gleiter. Length-scale effects in the nucleation of extended lattice dislocations in nanocrystalline Al by molecular-dynamics simulation // *Acta Mater.* **49**, 14, 2713-2722 (2001).
- [81] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter. Dislocation processes in the deformation of nanocrystalline aluminium by molecular-dynamics simulation // *Nature Materials* **1**, 1, 45-48 (2002).
- [82] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, H. Gleiter. Deformation twinning in nanocrystalline Al by molecular-dynamics simulation // *Acta Mater.* **50**, 20, 5005-5020 (2002).
- [83] P.M. Derlet, H. Van Swygenhoven. Length scale effects in the simulation of deformation properties of nanocrystalline metals // *Scripta Mater.* **47**, 11, 719-724 (2002).
- [84] P.M. Derlet, A. Hasnaoui, H. Van Swygenhoven. Atomistic simulations as guidance to experiments // *Scripta Mater.* **49**, 7, 629-635 (2003).
- [85] M.W. Chen, E. Ma, K.J. Hemker, H.W. Sheng, Y.M. Wang, X.M. Cheng. Deformation twinning in nanocrystalline aluminum // *Science* **300**, 5623, 1275-1277 (2003).
- [86] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, S.G. Srinivasan, M.I. Baskes, D.W. He, Y.T. Zhu. Deformation mechanism in nanocrystalline Al: Partial dislocation slip // *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4, 632-634 (2003).

- [87] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu. Deformation twins in nanocrystalline Al // *Appl. Phys. Lett.* **83**, 24, 5062–5064 (2003).
- [88] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov. Deformation twinning in nanocrystalline copper at room temperature and low strain rate // *Appl. Phys. Lett.* **84**, 4, 592–594 (2004).
- [89] V.L. Indenbom. On criteria of fracture in dislocation theories of strength // *Sov Phys Solid State* **3**, 7, 1506-1511 (1961).
- [90] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov. In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro, v.9, North Holland, Amsterdam, 1992, pp.191-402.
- [91] J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of dislocations*. John Wiley, New York, 1982.
- [92] T. Mura. *Advances in Materials Research* // vol. 3, Interscience Publ., New York, 1968, p. 1–108.
- [93] S.A. Lurie, A.L. Kalamkarov. General theory of defects in continuous media // *Int. J. Solids Struct.*, **43**, 1, 91-111 (2006).
- [94] Р. Де Вит, *Континуальная теория дисклинаций*. М., Мир, 1977, 208 с.
- [95] A.C. Eringen. Nonlocal continuum theory for dislocations and fracture // *The Mechanics of Dislocations*. Eds. E.C. Aifantis, J.P. Hirth, Metals Park, Ohio, American Society of Metals, 1985, p. 101-110.
- [96] Y.Z. Povstenko. Straight disclinations in nonlocal elasticity // *J. Phys. D.: Appl. Phys.*, **28**, 1, 105-111 (1995).
- [97] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. Dislocations in the theory of gradient elasticity // *Scr. Mater.* **40**, 5, 559-566 (1999).
- [98] М.Ю. Гуткин, Е.С. Айфантис. Дислокации и дисклинации в градиентной теории упругости // *ФТТ* **41**, 12, 2158-2166 (1999).
- [99] S.V. Bobylev. Theoretical Models of Dislocation Emission from Grain Boundaries in Deformed Nanocrystalline Materials // *MPM* **12**, 2, 126-160 (2011).
- [100] C.S. Pande, K.P. Cooper. Nanomechanics of Hall–Petch relationship in nanocrystalline materials // *Progr. Mater. Sci.* **54**, 6, 689-706 (2009).

- [101] J.D. Eshelby, F.C. Frank, F.R.N. Nabarro. XLI. The equilibrium of linear arrays of dislocations // *Philos. Mag.* **42**, 351-364 (1951).
- [102] V.I. Vladimirov, A.E. Romanov, *Disclinations in crystals* (Nauka, Leningrad, 1986).
- [103] H. Li, F. Ebrahimi. Transition of deformation and fracture behaviors in nanostructured face-centered-cubic metals // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 4307.
- [104] I.A. Ovid'ko. Review on the fracture processes in nanocrystalline materials // *J. Mater. Sci.* **42**, 5, 1694-1708 (2007).
- [105] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Nanocrack generation at dislocation-disclination configurations in nanocrystalline metals and ceramics // *Phys. Rev. B* **77**, 054109 (2008).
- [106] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Triple junction nanocracks in deformed nanocrystalline materials // *Acta Mater.* **52**, 5, 1201-1209 (2004).
- [107] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Special strain hardening mechanism and nanocrack generation in nanocrystalline materials // *Appl. Phys. Lett.* **90**, 171927 (2007).
- [108] A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova. Application of disclination concept to solid structures // *Progr. Mater. Sci.* **54**, 740-769 (2009).
- [109] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao. Hardness and fracture toughness of brittle materials: A density functional theory study // *Phys. Rev. B* **70**, 184117 (2007).
- [110] U. Kaiser, I.I. Khodos. On The Determination Of Partial Dislocation Burgers // *Phil. Mag. A* **82**, 3, 541-551 (2002).
- [111] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Enhanced ductility of nanomaterials through optimization of grain boundary sliding and diffusion processes // *Acta Mater.* **57**, 7, 2217-2228 (2009).
- [112] S.P. Mehandru, A.B. Anderson. Structures and energetics for polar and nonpolar SiC surface relaxations // *Phys. Rev. B* **42**, 9040 (1990).

- [113] И.Н. Фриндляндер, К.В. Чуистов, А.Л. Березина, Н.И. Колобов. Алюминий-литиевые сплавы. Структура и свойства. Наукова думка, Киев, 1993, 192 с.
- [114] И.И. Новиков, В.К. Портоной. Сверхпластичность сплавов с ультрамелким зерном. М., Металлургия, 1981, 168 с.
- [115] О.А. Кайбышев. Сверхпластичность промышленных сплавов. М. Металлургия, 1984, 263 с.
- [116] R.W. Siegel. Is superplasticity in the future of nanophase materials? // Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **196**, 1, 59-70 (1990).
- [117] J. Pilling, N. Ridley. Superplasticity in Crystalline Solids. London, The Institute of Metals, 1989, 175 p.
- [118] R.Z. Valiev, T.G. Langdon. An investigation of the role of intragranular dislocation strain in the superplastic lead-62% tin eutectic alloy // Acta Metall. **41**, 3, 949-954 (1993).
- [119] Г.А. Малыгин. Механизм деформационного упрочнения и образования дислокационных структур в металлах при больших пластических деформациях // ФТТ **48**, 4, 651-657 (2006).
- [120] Y.N. Wang and J.C. Huang. Comparison of grain boundary sliding in fine grained Mg and Al alloys during superplastic deformation // Scr. Mater. **48**, 8, 1117-1122 (2003).
- [121] Z.Y. Ma, R.S. Mishra, M.W. Mahoney and R. Grimes. High strain rate superplasticity in friction stir processed Al-Mg-Zr alloy // Mater. Sci. Eng. A **351**, 1-2, 148-153, (2003).
- [122] М.М. Мышляев, М.А. Прокунин, В.В. Шпейзман. Механическое поведение микрокристаллического алюминий-литиевого сплава в условиях сверхпластичности // ФТТ **43**, 5, 833-838 (2001).
- [123] В.В. Шпейзман, М.М. Мышляев, М.М. Камалов, М.М. Мышляева. Сверхпластичность микрокристаллического алюминий-литиевого сплава при кручении // ФТТ **45**, 11, 2008-2012 (2003).

- [124] A.A. Мазилкин, М.М. Камалов, М.М. Мышляев. Структура и фазовый состав сплава Al-Mg-Li-Zr в условиях высокоскоростной сверхпластичности // ФТТ **46**, 8, 1416-1421 (2004).
- [125] V.V. Astanin, O.A. Kaibyshev, S.N. Faizova. Cooperative grain-boundary sliding under superplastic flow // Scr. Metall. Mater. **25**, 12, 2663-2668 (1991).
- [126] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu. Deformation twins in nanocrystalline Al // Appl. Phys. Lett. **83**, 5062-5064 (2003).
- [127] M. Chen, E. Ma, K.J. Hemker, H. Sheng, Y. Wang, X. Cheng. Deformation twinning in nanocrystalline aluminum // Science **300**, 1275–1277 (2003).
- [128] X.Z. Liao, Y.H. Zhao, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov. Deformation twinning in nanocrystalline copper at room temperature and low strain rate // Appl. Phys. Lett. **84**, 592–594 (2004).
- [129] Y.M. Wang, A.M. Hodge, J. Biener, A.V. Hamza, D.E. Barnes, K. Liu, T.G. Nieh. Deformation twinning during nanoindentation of nanocrystalline Ta // Appl. Phys. Lett. **86**, 101915 (2005).
- [130] X.L. Wu, E. Ma. Dislocations and twins in nanocrystalline Ni after severe plastic deformation: the effects of grain size // Mater. Sci. Eng. A **483-484**, 84-86 (2008).
- [131] J.-Y. Zhang, G. Liu, R.H. Wang, J. Li, J. Sun, E. Ma. Double-inverse grain size dependence of deformation twinning in nanocrystalline Cu // Phys. Rev. B. **81**, 172104 (2008).
- [132] X.-L. Wu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, F. Zhou, E.J. Lavernia, R.Z. Valiev, Y.T. Zhu. New deformation twinning mechanism generates zero macroscopic strain in nanocrystalline metals // Phys. Rev. Lett. **100**, 095701 (2008).
- [133] X.-L. Wu, Y.T. Zhu. Inverse grain-size effect on twinning in nanocrystalline Ni // Phys. Rev. Lett. **101**, 025503 (2008).

- [134] X.Y. Zhang, X.L. Wu, A.W. Zhu. Growth of deformation twins in room-temperature rolled nanocrystalline nickel // *Appl. Phys. Lett.* **94**, 121907 (2009).
- [135] Y.T. Zhu, X.L. Wu, X.Z. Liao, J. Narayan, S.N. Mathaudhu, L.J. Kecskes. Twinning partial multiplication at grain boundary in nanocrystalline fcc metals // *Appl. Phys. Lett.* **95**, 031909 (2009).
- [136] Q. Li, M.L. Sui, S.X. Mao. Pseudoelastic stacking fault and deformation twinning in nanocrystalline Ni // *Appl. Phys. Lett.* **97**, 241912 (2010).
- [137] Г.А. Малыгин. Пластичность и прочность ГЦК-металлов с нанодвойникованной субмикрочеренной структурой // *ФТТ* **53**, 4, 711-715 (2010).
- [138] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.L. Wu. Deformation twinning in nanocrystalline materials // *Progr. Mater. Sci.* **57**, 1–62 (2012).
- [139] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Partial and split dislocation configurations in nanocrystalline metals // *Phys. Rev. B* **73**, 6, 064102 (2006).
- [140] R.J. Asaro, J. Suresh. Mechanistic models for the activation volume and rate sensitivity in metals with nanocrystalline grains and nano-scale twins // *Acta Mater.* **53**, 12, 3369-3382 (2005).
- [141] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Deformation twinning through nanoscale ideal shears in nano- and polycrystalline materials at ultra high stresses // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **27**, 189–194 (2011).
- [142] I.A. Ovid'ko. Nanoscale multiplane shear and twin deformation in nanowires and nanocrystalline solids // *Appl. Phys. Lett.* **99**, 061907 (2011).
- [143] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances in deformed Gum Metal // *Acta Mater.* **54**, 9, 2489-2499 (2006).
- [144] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Special mechanism for dislocation nucleation in nanomaterials // *Appl. Phys. Lett.* **88**, 211901(2006).

- [145] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.J. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang. Reversible Movement of Homogenously Nucleated Dislocations in a β -Titanium Alloy // *Phys. Rev. Lett.* **102**, 045503 (2009).
- [146] S.H. Oh, M. Legros, D. Kiener, G. Dehm. In situ observation of dislocation nucleation and escape in a submicrometre aluminium single crystal // *Nature Mater.* **8**, 2, 95-100 (2009).
- [147] M.J. Lagos, F. Sato, D.S. Galvao, D. Ugarte. Mechanical Deformation of Nanoscale Metal Rods: When Size and Shape Matter // *Phys. Rev. Lett.* **106**, 055501 (2011).
- [148] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Effect of CoO additive on structure and electrical properties of $(\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5})_{0.93}\text{Ba}_{0.07}\text{TiO}_3$ ceramics prepared by the citrate method // *Acta Mater.* **56**, 3, 642-650 (2008).
- [149] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances in Deformed Nanowires // *Phys. Rev. Lett.* **103**, 135501 (2009).
- [150] *Fracture Mechanics and Strength of Materials*, eds. by V.V. Panasuk (Naukova dumka, Kiev, 1988).
- [151] S. Kibey, J.B. Liu, D.D. Johnson, H. Sehitoglu. Predicting twinning stress in fcc metals: Linking twin-energy pathways to twin nucleation // *Acta Mater.* **55**, 20, 6843-6851 (2007).
- [152] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances and nanoscale deformation twins in fcc nanowires // *Phys. Rev. B* **83**, 054111 (2011).
- [153] R.G. Irwin. Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate // *J. Appl. Mech.* **24**, 361-364 (1957).
- [154] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis. Special rotational deformation as a toughening mechanism in nanocrystalline solids // *J. Mech. Phys. Solids* **58**, 8, 1088-1099 (2010).
- [155] В.В. Попов, Т.В. Теперик, F.J. Garc'a de Abajo. Фотонные зоны поглощения в спектрах нанопористых металлических пленок // *ФТТ* **49**, 7, 1206-1209 (2007).

- [156] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Misfit dislocations in nanocomposites with quantum dots, nanowires and their ensembles // *Adv. Phys.* **55**, 7-8, 627-689 (2006).
- [157] Ю.А. Бойков, В.А. Данилов. Электро- и магнетотранспортные свойства эпитаксиальных пленок $\text{La}_{0.67}\text{Ba}_{0.33}\text{MnO}_3$, двухосно механически сжатых подложкой // *ФТТ* **49**, 8, 1451-1455 (2007).
- [158] Б.А. Беляев, А.В. Изотов. Исследование влияния упругих напряжений на анизотропию магнитных пленок методом ферромагнитного резонанса // *ФТТ* **49**, 9, 1652-1659 (2007).
- [159] *Nanostructured Coatings* // edited by A. de Cavaleiro, J. Th.M. De Hosson. Springer Science + Business Media LLC, New York, 2006, 640 p.
- [160] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, 2007, 648 p.
- [161] H. Klostermann, F. Fietzke, T. Modes, O. Zywitzki. Zr-Al-N Nanocomposite Coatings Deposited by Pulse Magnetron Sputtering // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **15**, 1, 33-37 (2007).
- [162] A.M. Saad, V.A. Kalaev, J.A. Fedotova, K.A. Sitnikov, A.V. Sitnikov, Yu.E. Kalinin, A.K. Fedotov, V.A. Svito. Structure and Magnetic Properties of Nanogranular Composites CoFeZr –Alumina // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **15**, 3, 208-214 (2007).
- [163] L.T. Kabacoff. In: *Nanostructured Films and Coatings* // edited by G.-M. Chow, I.A. Ovid'ko, T. Tsakalakos. Kluwer, Dordrecht, 2000, P. 373.
- [164] A. Akbari, J.P. Riviere, C. Templier, E. Le Bourhis, G. Abadias. Hardness and Residual Stresses in TiN-Ni Nanocomposite Coatings Deposited by Reactive Dual Ion Beam Sputtering // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **15**, 2, 111-117 (2007).

- [165] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Special strain hardening mechanism and nanocrack generation in nanocrystalline materials // *Appl. Phys. Lett.* **90**, 171927 (2007).
- [166] И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман. Зарождение дисклинационных диполей и наноскопических трещин в деформируемых нанокерамиках // *ФТТ*, **50**, 6, 1002-1006 (2008).
- [167] A.F. Wright. Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN // *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997).
- [168] M. Kim, J. Ohta, A. Kobayashi, H. Fujioka, M. Oshima. Low-temperature growth of high quality AlN films on carbon face 6H-SiC // *Phys. Stat. Sol. (RRL)* **2**, 1, 13-15 (2008).
- [169] C.J. Rawn, J. Chaudhuri. Lattice parameters of gallium nitride at high temperatures and resulting epitaxial misfits with alumina and silicon carbide substrates // *JCPDS-International Central for Diffraction Data, Advances in X-ray Analysis* **43**, 338-343 (2000).
- [170] M.F. Doerner, D.W. Nix. Stresses and deformation processes in thin films on substrates // *Crit. Rev. Sol. State Mater. Sci.* **14**, 13, 225-268 (1988).
- [171] F. Spaepen. Interfaces and stresses in thin films // *Acta Mater.* **48**, 1, 31-42 (2000).
- [172] R.V. Goldstein, M.E. Sarychev. On an effect of dislocations on the surface tension at the interface between two materials // *Doklady Physics* **46**, 12, 853-855 (2001).
- [173] R.L. Coble. A Model for Boundary Diffusion Controlled Creep in Polycrystalline Materials // *J. Appl. Phys.* **34**, 6, 1679-1682 (1963).
- [174] R.A. Masumura, P.M. Hazzledine, C.S. Pande. Yield stress of fine grained materials // *Acta Mater.* **46**, 13, 4527-4534 (1998).
- [175] I.A. Ovid'ko. Deformation and Diffusion Modes in Nanocrystalline Materials // *Int. Mater. Rev.* **50**, 2, 65-82 (2005).

- [176] H.S. Kim, Y. Estrin, M.B. Bush. A study of mechanical properties and microscopic stress of a two-phase TiAl-based intermetallic alloy // *Mater. Sci. Eng. A* **315**, 1-2, 195-201 (2001).
- [177] C.J. Smithells, E.A. Brands. *Metals Reference Book*, Butterworth, London, 1976.
- [178] Yu.R. Kolobov, R.Z. Valiev, M.B. Ivanov, *et al.* *Grain Boundary Diffusion and Properties of Nanostructured Materials*, Cambridge Int. Science Publishing, Cambridge, 2007.
- [179] S. Labat, F. Bocquet, T. Bigault, L. Roussel, G. Mikaelian, C. Alfonso, A. Charai, O. Thomas. Of early stages of stress development during epitaxial growth of Ag/Cu multilayers // *MRS Proceedings* **791**, Q5.32 (2003).
- [180] R.V. Goldstein, N.F. Morozov. Mechanics of deformation and fracture of nanomaterials and nanotechnology // *Phys. Mesomechanics* **10**, 5-6, 235-246 (2007).
- [181] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee. Nanocrystalline-Matrix Ceramic Composites for Improved Fracture Toughness // *MRS Bullet.* **29**, 1, 22-27 (2004).
- [182] E.C. Aifantis. Deformation and failure of bulk nanograined and ultrafine-grained materials // *Mater. Sci. Eng. A* **503**, 1-2, 190-197 (2009).
- [183] R.A. Andrievski. Synthesis, Structure and Properties of Nanosized Silicon Carbide // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **22**, 1/2, 1-20 (2009).
- [184] H.A. Padilla II, B.K. Boyce. A Review of Fatigue Behavior in Nanocrystalline Metals // *Exp. Mech.* **50**, 1, 5-23 (2010).
- [185] J.R. Rice, R.M. Thompson. Ductile vs. brittle behaviour of crystals // *Phil. Mag.* **29**, 73-97 (1974).
- [186] J.R. Rice. Dislocation nucleation from a crack tip: An analysis based on Peierls concept // *J. Mech. Phys. Sol.* **40**, 2, 239 (1992).

- [187] S. Bhaduri, S.B. Bhaduri. Enhanced low temperature toughness of Al₂O₃-ZrO₂ nano/nano composites // *Nanostruct. Mater.* **8**, 6, 755-763 (1997).
- [188] Y. Zhao, J. Qian, L.L. Daemen, C. Pantea, J. Zhang, G.A. Voronin, T.W. Zerda. Enhancement of fracture toughness in nanostructured diamond-SiC composites // *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1356 (2004).
- [189] A.A. Kaminskii, M.Sh. Akchurin, R.V. Gainutdinov, K. Takaichi, A. Shirakava, H. Yagi, T. Yanagitani, K. Ueda. Microhardness and fracture toughness of Y₂O₃-and Y₃Al₅O₁₂-based nanocrystalline laser ceramics // *Crystallography Reports* **50**, 5, 869-873 (2005).
- [190] Y.T. Pei, D. Galvan, J.T.M. De Hosson. Nanostructure and properties of TiC/a-C:H composite coatings // *Acta Mater.* **53**, 17, 4505-4521 (2005).
- [191] A. Mukhopadhyay, B. Basu. Consolidation-microstructure-property relationships in bulk nanoceramics and ceramic nanocomposites: a review // *Int. Mater. Rev.* **52**, 5, 257-288 (2007).
- [192] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis. Stress-driven migration of grain boundaries and fracture processes in nanocrystalline ceramics and metal // *Acta Mater.* **56**, 12, 2718-2727 (2008).
- [193] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis. Effect of Grain Boundary Migration on Fracture Toughness of Nanocrystalline Materials // *Phys. Mech. Mater.* **8**, 2, 155-164 (2009).
- [194] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis. Special rotational deformation as a toughening mechanism in nanocrystalline solids // *J. Mech. Phys. Solids* **58**, 8, 1088-1099 (2010).
- [195] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Effects of intergrain sliding on crack growth in nanocrystalline materials // *Int. J. Plasticity* **26**, 11, 1629-1644 (2010).
- [196] W. Yang, H.T. Wang. Brittle versus ductile transition of nanocrystalline metals // *Int. J. Sol. Struct.* **45**, 13, 3897-3907 (2008).

- [197] F. Yang, W. Yang. Crack growth versus blunting in nanocrystalline metals with extremely small grain size // *J. Mech. Phys. Solids* **57**, 2, 305-324 (2009).
- [198] X. Wu, N. Tao, Y. Hong, G. Liu, B. Xu, J. Lu, K. Lu. Strain-induced grain refinement of cobalt during surfacemechanical attrition treatment // *Acta Mater.* **53**, 681-691 (2005).
- [199] Y. Champion, C. Langlois, S. Guerin-Mailly, P. Langlois, J.-L. Bonnentien, M. Hytch. Near-Perfect Elastoplasticity in Pure Nanocrystalline Copper // *Science* **300**, 5617, 310-311 (2003).
- [200] X.Z. Liao, Y.H. Zhao, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov. Grain-size effect on the deformation mechanisms of nanostructured copper processed by high-pressure torsion // *J. Appl. Phys.* **96**, 636 (2004).
- [201] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanograin nucleation initiated by intergrain sliding and/or lattice slip in nanomaterials // *Appl. Phys. Lett.* **92**, 081914 (2008).
- [202] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanograin nucleation, nanoscale amorphization and transformations of disclinations in deformed nanomaterials // *Phys. Mech. Mater.* **8**, 1, 65-82 (2009).
- [203] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. *Interfaces in crystalline materials*, Clarendon Press, Oxford, 1995.
- [204] R.G. Munro. Evaluated Material Properties for a Sintered alpha-Alumina // *J. Am. Ceram. Soc.* **80**, 8, 1919-1928 (1997).
- [205] M. Legros, D.S. Gianola, K.J. Hemker. In situ TEM observations of fast grain-boundary motion in stressed nanocrystalline aluminum films // *Acta Mater.* **56**, 14, 3380-3393 (2008).
- [206] T. Watanabe, H. Yoshida, T. Saito, T. Yamamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma. Grain Boundary Energy and Atomic Structure in Alumina Bicrystals // *Mater. Sci. Forum* **304-306**, 601-608 (1999).
- [207] C.J. Smithells and E.A. Brands, *Metals reference book*. London, Butterworths, 1976.

- [208] A. Otsuki and M. Mizuno, Grain boundary structure and related phenonema, Suppl. Trans // JIM 27 (Japan Institute of Metals) p. 789.
- [209] G.C. Hasson, C. Goux. Interfacial energies of tilt boundaries in aluminium. Experimental and theoretical determination // Scripta Metall. 5, 10, 889-894 (1971).

Л.2 Список публикаций по теме диссертации

- [1a] Н.В. Скиба. Зернограничные механизмы релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и подложках // Физика и механика материалов, Т. 19, № 1, С. 68-87 (2014).
- [2a] 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 // Reviews on Advanced Materials Science, Vol. 37, № 1/2, P. 29-36 (2014).
- [3a] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Nanotwins induced by grain boundary deformation processes in nanomaterials // Scripta Materialia, Vol. 71, P. 33-36 (2014).
- [4a] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Влияние зарождения цепочек наноскопических зерен вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических керамик // Доклады Академии наук, Т. 405, № 4, С. 413-416 (2013).
- [5a] 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, Т. 453, № 6, С. 630-633 (2013).
- [6a] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Formation of nanoscopic grains due to dislocation pile-up transformations in deformed ultrafine-grained materials // Reviews on Advanced Materials Science, Vol. 35, № 1/2, P. 96-103 (2013).

- [7a] 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 // *Reviews on Advanced Materials Science*, Vol. 32, № 1, P. 75-81 (2012).
- [8a] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials // *Scripta Materialia*, Vol. 67, № 1, P.13-16 (2012).
- [9a] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, N.V. Skiba. Elongated nanoscale voids at deformed special grain boundary structures in nanocrystalline materials // *Acta Materialia*, Vol. 59, P. 678-685 (2011).
- [10a] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Stress-driven formation of nanograin chains in nanocrystalline and ultrafine-grained materials // *Reviews on Advanced Materials Science*, Vol. 29, № 2, P. 180-186 (2011).
- [11a] И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Процессы зарождения новых наноскопических зерен вблизи вершин трещин в деформируемых нанокристаллических материалах // *Физика и механика материалов*, Т. 11, № 2, С. 105-117 (2011).
- [12a] D.A. Indeitsev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Nucleation of nanoscale voids at disclination quadrupoles in deformed nanocrystalline materials // *Reviews on Advanced Materials Science*, Vol. 26, № 1/2, P. 91-97 (2010).
- [13a] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba, A.K. Mukherjee. Nucleation of nanograins near cracks in nanocrystalline materials // *Scripta Materialia*, Vol. 62, P. 387-390 (2010).
- [14a] 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).

- [15a] Н.В. Скиба, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман. Диполи дисклинаций несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях // Физика твердого тела, Т. 51, № 2, С. 265-270 (2009).
- [16a] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Giant faults in deformed Gum Metal // International Journal of Plasticity, Vol. 24, № 8, P. 1333-1359 (2008).
- [17a] 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, № 8, P. 1137-1151 (2008).
- [18a] И.А. Овидько, Н.В. Скиба, А.Г. Шейнерман. Влияние зернограничного скольжения на трещиностойкость нанокристаллических керамик // Физика твердого тела, Т. 50, № 7, С. 1211-1215 (2008).
- [19a] 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. 455212(1-7) (2008).
- [20a] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Влияние включений на гетерогенное зарождение трещин в нанокompозитных материалах // Физика твердого тела, Т. 49, № 2, С. 252-257 (2007).
- [21a] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Механизм образования деформационных двойников в нанокристаллических материалах // Физика твердого тела, Т. 49, № 5, С. 830-838 (2007).
- [22a] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, N.V. Skiba. Stress relaxation through local migration of interfaces in nanocrystalline coatings // Reviews on Advanced Materials Science, Vol. 16, № 1/2. P. 102-107 (2007).
- [23a] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Generation of deformation twins in nanocrystalline metals: Theoretical model // Physical Review B, Vol. 74, № 21, P. 172107(1-4) (2006).

- [24a] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Emission of partial dislocations from triple junctions of grain boundaries in nanocrystalline materials // *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 38, P. 3921-3925 (2005).
- [25a] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Generation of nanocracks at grain boundary disclinations in nanocomposite materials // *Reviews on Advanced Materials Science*, Vol. 10, № 5, P. 483-389 (2005).
- [26a] 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. Ovid'ko, 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 // *Reviews on Advanced Materials Science*, Vol. 9, № 1, P. 45-108 (2005).
- [27a] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Зернограничное скольжение и эмиссия решеточных дислокаций в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации // *Физика твердого тела*, Т. 47, № 9, С. 1602-1613 (2005).
- [28a] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Strengthening and softening mechanisms in nanocrystalline materials under superplastic deformation // *Acta Materialia*, Vol. 52, № 6, P. 1711-1720 (2004).
- [29a] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба Эмиссия частичных дислокаций границами зерен в нанокристаллических металлах // *Физика твердого тела*, Т. 46, № 11. С. 1975-1985 (2004).
- [30a] M.Yu. 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, № 12, P. L47-L50 (2003).
- [31a] 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, № 8, P. 1173-1181 (2003).

- [32a] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Crossover from grain boundary sliding to rotational deformation in nanocrystalline materials // *Acta Materialia* Vol. 51, № 14, P. 4059-4071 (2003).
- [33a] M.Yu. 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, № 1-2, P. 73-80 (2003).
- [34a] M.Yu. Gutkin, A.L. Kolesnikova, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Disclinations and rotational deformation in fine-grained materials // *Philosophical Magazine Letters*, Vol. 82, № 12, P. 651-657 (2002).
- [35a] 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 // *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*, Vol. 12, P. 47-57 (2002).
- [36a] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Изменение разориентировок границ зерен при эмиссии пар дислокаций // *Письма в ЖТФ*, Т. 28, № 10, С. 78-82 (2002).