

УДК 539.2;539.3;548.4

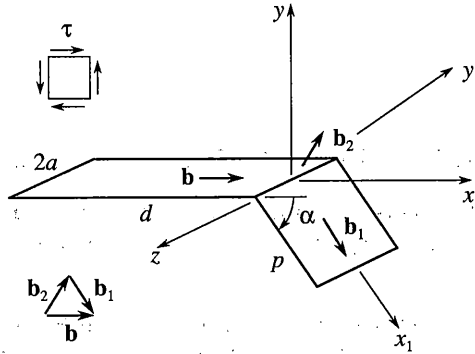
© 2007 г. М.Ю. ГУТКИН, И.А. ОВИДЬКО

ЗАРОЖДЕНИЕ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ И ПЛАСТИЧЕСКАЯ ДЕФОРМАЦИЯ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Предложена трехмерная модель пластической деформации механически нагруженного нанокристаллического материала путем гетерогенного зарождения петель полных и частичных решеточных дислокаций, а также петель зернограничных дислокаций на уже сформировавшихся дислокационных петлях. Рассчитаны и сопоставлены изменения энергии, характеризующие различные варианты зарождения дислокационных петель. Выявлены три основных диапазона изменения размера зерна нанокристаллического материала, для которых характерны свои варианты зарождения петель. Рассмотрена роль зарождения петель при пластической и сверхпластической деформации в нанокристаллических материалах.

Нанокристаллические материалы (НКМ), обладающие исключительно высокими механическими свойствами, являются в настоящее время объектом интенсивных фундаментальных и прикладных исследований, которые стимулируются огромными перспективами использования НКМ для развития новых технологий [1–4]. Уникальность деформационного поведения НКМ объясняется сочетанием обычного скольжения решеточных дислокаций, которое доминирует в крупнозернистых материалах, с альтернативными механизмами пластической деформации, связанными с границами зерен (ГЗ). К таковым относятся зернограничное скольжение [5–10], диффузионная ползучесть по ГЗ и их тройным стыкам [11–15], и ротационная деформация [16–24]. Недавно в деформируемых НКМ было также обнаружено интенсивное двойникование, осуществляемое за счет движения частичных решеточных дислокаций [25–28], причем оказалось, что в нанокристаллическом состоянии двойники образуются даже в тех металлах, которые не двойнируются в обычном крупнозернистом состоянии.

При теоретическом описании механизмов пластичности НКМ обычно предполагается, что либо доминирует какой-то один из механизмов пластической деформации, либо несколько механизмов действуют одновременно и независимо друг от друга (см., например, [1–3, 11, 12, 14]). Однако НКМ представляют собой конгломераты наноразмерных зерен, которые могут деформироваться по различным механизмам, сильно влияющим друг на друга. Такое взаимодействие между механизмами пластической деформации безусловно следует учитывать. Особенно это касается такого явления как высокоскоростная сверхпластичность НКМ, которая, как показывают эксперименты [7, 29–33], включает в себя зернограничное скольжение, вращение зерен и скольжение решеточных дислокаций – основные механизмы деформации, сильно взаимодействующие между собой. В работах [15, 33–36] были предложены двумерные модели трансформации прямолинейных зернограничных дислокаций в прямолинейные решеточные дислокации и обратно применительно к НКМ. Однако в реальных НКМ скольжение решеточных дислокаций, двойникование и зернограничное скольжение должны рассматриваться как трехмерные процессы, осуществляемые путем зарождения и распространения дислокационных петель, а не прямолинейных дислокаций. Поэтому трехмерное описание механизмов пластической деформации с помощью моделей зарождающихся дисло-



Фиг. 1

кационных петель представляется особенно важным для понимания основ пластического и сверхпластического течения в деформируемых НКМ.

Целью данной статьи является изложение универсальной трехмерной теоретической модели, описывающей гетерогенное зарождение петель полных решеточных, частичных решеточных и зернограничных дислокаций на уже существующих в материале дислокационных петлях. На основе полученных результатов обсуждается совместное действие основных механизмов высокоскоростной сверхпластичности в НКМ – скольжения решеточных дислокаций, ротационной деформации и межзеренного скольжения.

Рассмотрим пару скользящих дислокационных петель прямоугольной формы с векторами Бюргерса \mathbf{b} , \mathbf{b}_1 и соответственно размерами $d \times 2a$, $p \times 2a$ (фиг. 1). Ширина этих петель $2a$ взята одинаковой для упрощения последующих расчетов. Петли имеют общий сегмент разностной краевой дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b}_2 = \mathbf{b} - \mathbf{b}_1$. Угол между плоскостями петель обозначим α . С плоскостями петель свяжем две системы декартовых координат (x, y, z) и (x_1, y_1, z) , повернутые относительно друг друга на угол α вокруг оси z , с общим началом в середине общего сегмента.

Предложенная дефектная конфигурация удобна для анализа зарождения новых скользящих петель на сегментах уже существующих петель. В данном случае роль исходной петли будет играть петля с вектором Бюргерса \mathbf{b} (b -петля), которая поджата внешним сдвиговым напряжением τ к некоторым препятствиям, не позволяющим ей расширяться дальше. В такой ситуации сегменты петли могут служить источниками для зарождения новых петель, способных распространяться по той же или по другим плоскостям скольжения. Здесь роль новой зарождающейся скользящей петли будет играть петля с вектором Бюргерса \mathbf{b}_1 (b_1 -петля). Анализ условий зарождения и расширения новой петли удобно проводить в рамках квазиравновесного энергетического подхода, исследуя изменение полной энергии нашей модельной системы в процессе испускания b_1 -петли. Для расчета полной энергии системы двух упруговзаимодействующих петель потребуется поле упругих напряжений одной из таких петель, например, b -петли. В рамках линейной изотропной упругости компоненты этого поля в системе координат (x, y, z) имеют следующий вид [37]:

$$\sigma_{xx} = \frac{Dbuy}{2(v^2 + y^2)\rho} \left(1 + \frac{v^2}{\rho^2} + \frac{2v^2}{v^2 + y^2} \right) \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{x'=-d}^{x'=0} \quad (1)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{Dbuy}{2(v^2 + y^2)\rho} \left(-1 + \frac{y^2}{\rho^2} + \frac{2y^2}{v^2 + y^2} \right) \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{x'=-d}^{x'=0} \quad (2)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{Dbuy}{2(v^2 + y^2)\rho} \left(-1 + 2v + \frac{u^2}{\rho^2} \right) \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{x'=-d}^{x'=0} \quad (3)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{Dbuv}{2(v^2 + y^2)\rho} \left(-1 + \frac{y^2}{\rho^2} + \frac{2y^2}{v^2 + y^2} - (1-v) \frac{v^2 + y^2}{u^2 + y^2} \right) \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{x'=-d}^{x'=0} \quad (4)$$

$$\sigma_{xz} = \frac{Dbvy}{2(u^2 + y^2)\rho} \left(-v + \frac{v^2}{\rho^2} \right) \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{x'=-d}^{x'=0} \quad (5)$$

$$\sigma_{yz} = \frac{Db}{2\rho} \left(v - \frac{y^2}{\rho^2} \right) \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{x'=-d}^{x'=0} \quad (6)$$

$$D = \frac{G}{2\pi(1-\nu)}, \quad v = x-x', \quad u = z-z', \quad \rho^2 = v^2 + u^2 + y^2$$

где G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона. Нетрудно убедиться, что эти компоненты удовлетворяют уравнениям равновесия $\partial_i \sigma_{ij} = 0$, где символ ∂_i означает частную производную по координате i ($i = x, y, z$), и действует правило суммирования по повторяющемуся индексу. В предельном случае $a, d \rightarrow \infty$ (1)–(6) преобразуются в компоненты поля напряжений прямолинейной краевой дислокации с вектором Бюргера \mathbf{b} . Аналогично записывается и поле напряжений b_1 -петли в системе координат (x_1, y_1, z) .

Собственную упругую энергию каждой из этих петель можно рассчитать либо как работу по зарождению петли в ее собственном поле напряжений [38, 39], либо напряжную, с использованием ее пластической дисторсии и тензорной функции Грина [38–40]. Для данных петель это дает собственные упругие энергии W_s (для b -петли) и W_{s1} (для b_1 -петли) в виде [40]:

$$W_s = Db^2 \left\{ (2-\nu)(r-d-2a) + 2a \ln \frac{4ad}{r_c(r+2a)} + (1-\nu)d \ln \frac{4ad}{r_c(r+d)} \right\} \quad (7)$$

$$W_{s1} = Db_1^2 \left\{ (2-\nu)(h-d-2a) + 2a \ln \frac{4ad}{r_{c1}(h+2a)} + (1-\nu)p \ln \frac{4ad}{r_{c1}(h+d)} \right\} \quad (8)$$

$$r^2 = d^2 + 4a^2, \quad h^2 = p^2 + 4a^2$$

где $r_c \approx b$ и $r_{c1} \approx b_1$ – соответственно радиусы обрезания упругого поля b - и b_1 -петель на их линиях.

Энергию упругого взаимодействия двух петель удобно рассчитать как работу по зарождению одной петли в поле напряжений другой [38, 39]. Например, при $\alpha = 0$ энергию взаимодействия $W_{int}(\alpha = 0)$ петля можно определить как работу по зарождению b_1 -петли в поле напряжений σ_{xy} b -петли

$$W_{int}(\alpha = 0) = -b_1 \int_{r_c}^p \int_{-a}^a dz \sigma_{xy}(x, y = 0, z) \quad (9)$$

где σ_{xy} определяется выражением (4). Вычисление этого двойного интеграла дает следующий результат:

$$W_{\text{int}}(\alpha = 0) = -Db b_1 \left\{ (2 - \nu)(r + h - 2a - R) + 2a \ln \frac{4adp(R + 2a)}{r_c L(r + 2a)(h + 2a)} + (1 - \nu) \left(d \ln \frac{d(R + L)}{L(r + d)} + p \ln \frac{p(R + L)}{L(h + p)} \right) \right\} \quad (10)$$

$$L^2 = p^2 + 2pd \cos \alpha + d^2, \quad R^2 = L^2 + 4a^2$$

В правильности выражений (7)–(10) можно убедиться, положив (при $\alpha = 0$) $b = b_1$ и сравнивая собственную упругую энергию объединенной скользящей петли с размерами $(d + p) \times 2a$, которая записывается аналогично (7)–(8), с полной упругой энергией системы из двух петель, которая определяется суммой вкладов (7), (8) и (10). Как и должно быть, оба эти способа дают одно и то же выражение

$$W_{\text{el}} = Db^2 \left\{ (2 - \nu)(R - L - 2a) + 2a \ln \frac{4aL}{r_c(R + 2a)} + (1 - \nu)L \ln \frac{4aL}{r_c(R + L)} \right\} \quad (11)$$

Обратимся теперь к рассмотрению энергетики зарождения и расширения b_1 -петли в общем случае произвольного угла α .

Полная энергия исходной b -петли состоит из двух слагаемых

$$W_1 = W_s + W_c \quad (12)$$

где собственная упругая энергия W_s определяется выражением (7), а энергия ядра петли W_c аппроксимируется обычным образом [41]

$$W_c = Db^2 [2a + (1 - \nu)d] \quad (13)$$

Расщепление под действием внешнего сдвигового напряжения τ одного из краевых сегментов b -петли и зарождение на нем новой b_1 -петли (фиг. 1) формирует новую дефектную конфигурацию, полную энергию которой можно записать в виде:

$$W_2 = W_s + W_{s1} + W_{\text{int}} + W'_c + W'_{c1} + W_{c2} + W_f - A \quad (14)$$

где W_{s1} – собственная упругая энергия новой b_1 -петли; W_{int} – энергия упругого взаимодействия между петлями; W'_c – энергия ядер трех сегментов b -петли, не изменившихся в процессе испускания новой петли; W'_{c1} – энергия ядер трех новых сегментов b_1 -петли; W_{c2} – энергия ядра нового сегмента, общего для b - и b_1 -петли, с вектором Бюргерса \mathbf{b}_2 ; W_f – энергия дефекта упаковки, возникающего при зарождении b_1 -петли частичной дислокации; A – работа внешнего напряжения τ по зарождению b_1 -петли.

Таким образом, изменение полной энергии системы при зарождении b_1 -петли описывается разностью энергий ΔW :

$$\Delta W = W_2 - W_1 = W_{s1} + W_{\text{int}} + (W'_c - W_c) + W'_{c1} + W_{c2} + W_f - A \quad (15)$$

Собственная упругая энергия b_1 -петли W_{s1} определяется выражением (8). Энергию упругого взаимодействия петель W_{int} определим как работу по зарождению b_1 -петли в

поле сдвигового напряжения b -петли $\sigma_{x_1 y_1}$, действующего в плоскости зарождения и развития b_1 -петли:

$$W_{\text{int}} = -b_1 \int_{r_c}^p dx_1 \int_{-a}^a \sigma_{x_1 y_1}(x_1, y_1 = 0, z) dz \quad (16)$$

Компонента $\sigma_{x_1 y_1}$ записывается по стандартному правилу преобразования компонент тензора при повороте системы координат на угол α :

$$\sigma_{x_1 y_1}(x_1, y_1, z) = 1/2(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) \sin(2\alpha) + \sigma_{xy} \cos(2\alpha) \quad (17)$$

где компоненты σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{xy} определяются соответственно выражениями (1), (2) и (4). Координаты (x_1, y_1) повернутой системы координат связаны с исходными координатами (x, y) соотношениями

$$x = x_1 \cos \alpha + y_1 \sin \alpha \quad (18)$$

$$y = y_1 \cos \alpha - x_1 \sin \alpha \quad (19)$$

Подставляя (17) с учетом (1), (2), (4), (18) и (19) в (16) и вычисляя с помощью таблиц [42] этот двойной интеграл, получаем следующее выражение для энергии взаимодействия:

$$\begin{aligned} W_{\text{int}} = & -Db b_1 \left\{ \cos \alpha \left(L - R + r + h - 2a - d - p + 2a \ln \frac{4ap}{r_c(h + 2a)} \right) + \right. \\ & + \frac{d}{2L^2} [2pL(4 \cos^2 \alpha \cos(2\alpha) - \sin^2 \alpha) - 8L(L - d) \cos^3 \alpha + pR(1 - \cos(2\alpha))] + \\ & + [1 - \cos(4\alpha) - 2(1 - \nu) \cos(2\alpha)] \frac{d}{2} \ln \frac{(L + d \cos \alpha + p)(r + d \cos \alpha)}{(R + d \cos \alpha + p)(1 + \cos \alpha)d} + \\ & + \frac{d^2 \sin^2 \alpha (4 \cos^2 \alpha + \cos \alpha - 1) - 2a^2 \cos \alpha}{4a} \ln \frac{L(r + 2a)}{d(R + 2a)} + \\ & + \frac{\sin \alpha [a^2 - 2d^2 \cos^2 \alpha \cos(2\alpha)]}{a} \times \\ & \times \left(\operatorname{arctg} \frac{2a(p + d \cos \alpha)}{Rd \sin \alpha} - \operatorname{arctg} \frac{2a}{r \operatorname{tg} \alpha} \right) - \\ & - (1 - \nu) \cos(2\alpha) \left[p \ln \frac{(L + p \cos \alpha + d)(h + p \cos \alpha)}{(R + p \cos \alpha + d)(1 + \cos \alpha)p} - \right. \\ & \left. - \frac{2a}{\sin \alpha} \left(\frac{\pi}{2} - \alpha - \operatorname{arctg} \frac{2a[p - (R - d) \cos \alpha]}{\sin \alpha [r^2 - d(R - p \cos \alpha)]} + \operatorname{arctg} \frac{p - h \cos \alpha}{2a \sin \alpha} - \operatorname{arctg} \frac{2a}{r \operatorname{tg} \alpha} \right) \right] \left. \right\} \quad (20) \end{aligned}$$

Это выражение получено для интервала изменения угла α (в радианах) от 0 до $\pi/2$. В предельном случае $\alpha \rightarrow 0$ формула (20) обращается в (10).

Энергии дислокационных ядер в правой части (15) аппроксимируются стандартным образом [41]:

$$W'_c - W_c = -Db^2a \quad (21)$$

$$W'_{c1} = Db_1^2[a + (1 - \nu)(p - b_1/2 - b_2/2)] \quad (22)$$

$$W_{c2} = Db_2^2a, \quad b_2^2 = b^2 + b_1^2 - 2bb_1 \cos \alpha \quad (23)$$

Тогда полное изменение энергии ΔW_c дислокационных ядер в процессе зарождения новой b_1 -петли записывается в виде

$$\Delta W_c = D\{2b_1(b_1 - b \cos \alpha)a + b_1^2(1 - \nu)(p - b_1/2 - b_2/2)\} \quad (24)$$

Энергия дефекта упаковки W_f для случая b_1 -петли частичной дислокации определяется простым выражением

$$W_f = 2\gamma(a - b_1)(p - b_1 - b_2) \quad (25)$$

где γ – плотность энергии дефекта упаковки.

Наконец, работа A внешнего сдвигового напряжения τ по зарождению b_1 -петли рассчитывается как

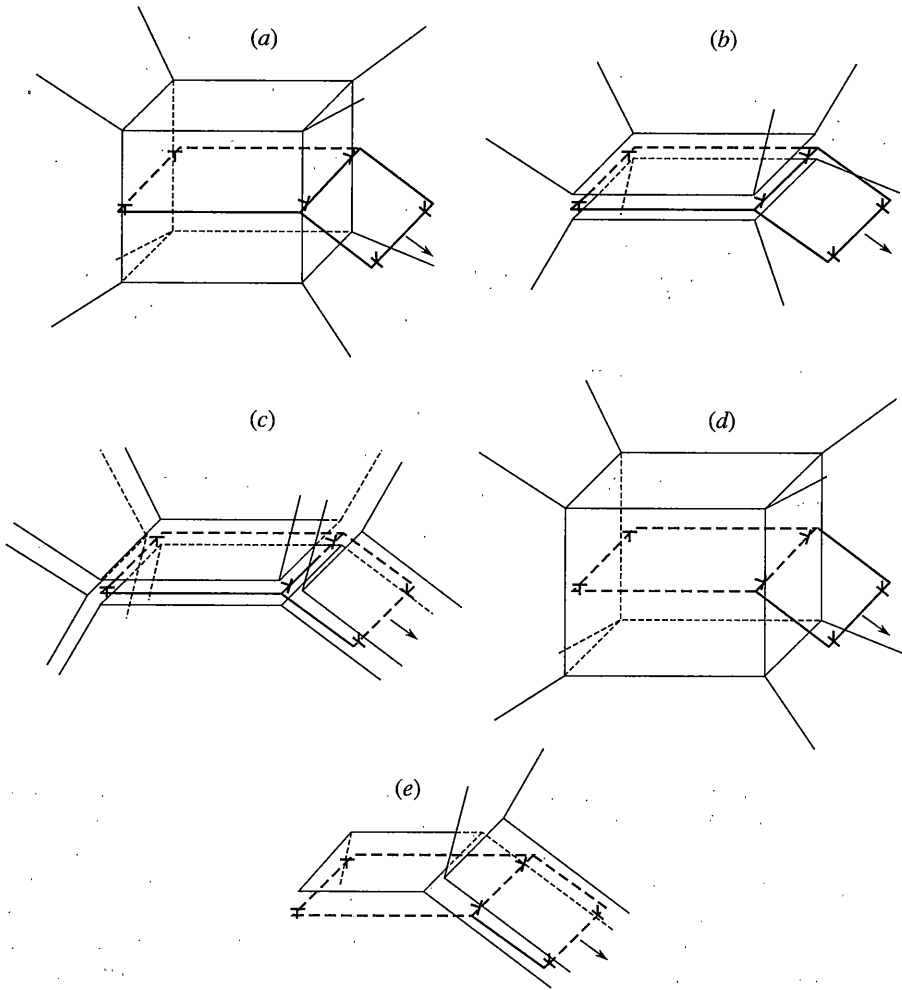
$$A = \tau b_1 2ap \cos(2\alpha) \quad (26)$$

Таким образом, все слагаемые правой части (15) определены, и можно перейти к рассмотрению различных конкретных вариантов гетерогенного зарождения новых петель.

Исходная дислокационная петля может залегать либо в межзеренной границе, либо в самом зерне. В первом случае имеем дело с петлей зернограницной дислокации, во втором – с петлей полной или частичной решеточной дислокации. Будем считать, что в первом случае петля либо охватывает зерно, либо залегает на фасетке границы зерна и поджата внешним сдвиговым напряжением τ к тройным стыкам зерен, которые ограничивают эту фасетку. При этом характерный размер петли имеет величину не больше размера зерна (для кубических зерен эти размеры совпадают, для полиэдрических – размер петли примерно в 1–2 раза меньше размера зерна). Во втором случае петля поджата напряжением τ к границам зерна и имеет размер порядка размера зерна.

На исходной петле зернограницной дислокации может зародиться петля решеточной дислокации, полной или частичной (фиг. 2,а,б), или петля другой зернограницной дислокации (фиг. 2,с). На исходной петле решеточной дислокации (полной или частичной) может также зародиться петля другой решеточной дислокации (полной или частичной) в соседнем зерне (фиг. 2,д) или петля зернограницной дислокации (фиг. 2,е). Таким образом, существует 9 возможных вариантов гетерогенного зарождения новых дислокационных петель на уже существующих в наноматериале дислокационных петлях. Полученное в предыдущем разделе выражения (15) (с учетом формул (8), (20), (24)–(26)) позволяет провести численный анализ каждого из этих вариантов и отобрать среди них наиболее вероятные для заданной геометрии системы.

В работе исследовалась возможность реализации каждого из перечисленных вариантов. В качестве модельного материала был взят чистый нанокристаллический Al с размером зерна порядка 10–100 нм, модулем сдвига $G = 27$ ГПа и коэффициентом Пуассона $\nu = 0.34$ [41]. Величина вектора Бюргерса полной решеточной дислокации в Al составляет 0.286 нм [41]. Величину вектора Бюргерса зернограницной дислокации для определенности примем равной 0.1 нм [43]. Для энергии дефекта упаковки возьмем оценку $\gamma = 0.120$ Дж м⁻², которая соответствует верхней границе расчетной γ (от 0.104 до

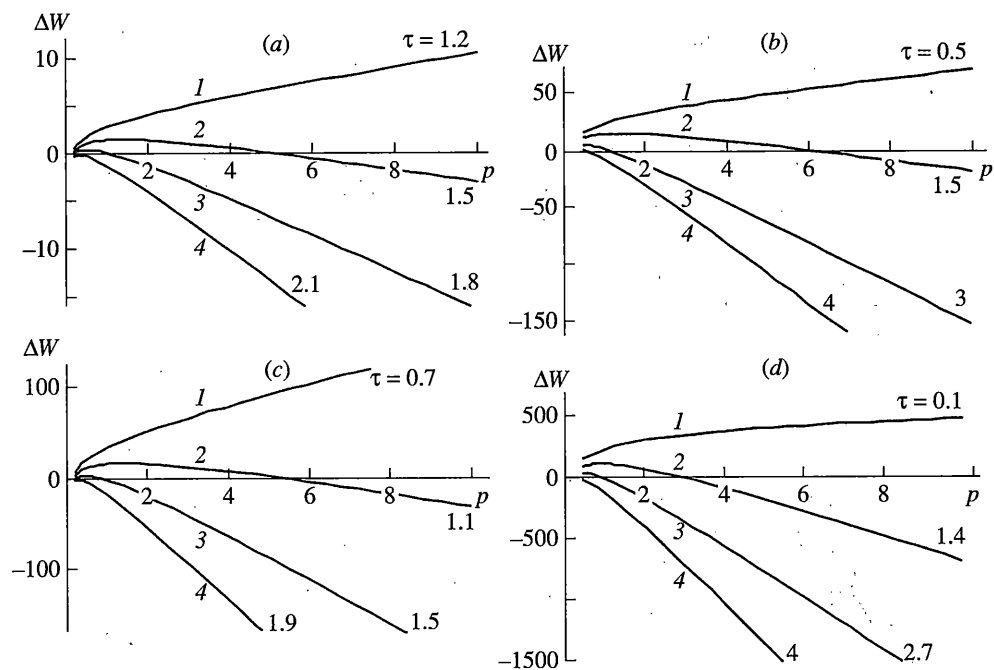


Фиг. 2

0.122 Дж м⁻²) и нижней границе измеренной экспериментально γ (от 0.120 до 0.142 Дж м⁻²) в чистом Al [44–46].

Поскольку исходная дислокационная петля представляет собой довольно слабый источник упругих напряжений [41], то зарождение на ней новой петли требует преодоления некоторого энергетического барьера, величина и протяженность которого могут быть довольно значительными. При выполнении расчетов учитывалась тепловая энергия кристаллической решетки, которая понижает возникающие при зарождении барьеры на величину $nk_B T$. Здесь n – число атомов на фронте растущей петли, k_B – постоянная Больцмана и T – абсолютная температура. Все вычисления проводились для комнатной температуры $T = 300$ К.

В качестве примера рассмотрим схему, показанную на фиг. 2, *a, b*. Прямоугольная петля скользящей зернограничной дислокации с размерами $d \times 2a$ и вектором Бюргерса \mathbf{b} либо охватывает зерно прямоугольного сечения (фиг. 2, *a*), либо лежит на фасетке границы зерна и поджата к тройным стыкам, ограничивающим эту фасетку (фиг. 2, *b*).



Фиг. 3

Один из двух краевых сегментов петли расщепляется на два сегмента той же длины с векторами Бюргерса \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 (в случае испускания сегмента частичной решеточной дислокации) или $2\mathbf{b}_1$ и \mathbf{b}_2 (в случае испускания сегмента полной решеточной дислокации). Эти векторы Бюргерса удовлетворяют очевидному уравнению: $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = 2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$. Отщепившийся сегмент частичной (с вектором Бюргерса \mathbf{b}_1) или полной (с вектором Бюргерса $2\mathbf{b}_1$) решеточной дислокации преодолевает тройной стык границ зерен и начинает скользить в глубь зерна по своей плоскости скольжения, ориентированной под углом α к плоскости залегания исходной петли зернограницной дислокации.

Заметим, что при рассмотрении зарождения петли частичной дислокации пренебрегается той винтовой компонентой вектора Бюргерса, которая должна была бы присутствовать у отщепившегося сегмента в гранецентрированной кубической решетке алюминия при заданной геометрии. Величина этой компоненты очень мала (0.022 нм) по сравнению с рассматриваемой краевой компонентой (0.143 нм) [41], так что ее учет не может привести к существенным поправкам, но он бы очень сильно осложнил расчетную процедуру в такой трехмерной постановке.

Изменение полной энергии системы ΔW [эВ] при зарождении и увеличении новой петли частичной или полной решеточной дислокации под действием внешнего сдвигового напряжения τ показано соответственно на фиг. 3,а,с и фиг. 3,б,д. Здесь приведены результаты, полученные для квадратной формы исходной зернограницной петли со стороной $d = a = 5$ нм (фиг. 3,а,б) и 50 нм (фиг. 3,с,д) при $\alpha = 0$. Уровни приложенного напряжения τ в гигапаскалях показаны у соответствующих им кривых. Расчеты для прямоугольных петель при $d \neq 2a$ также проводились, но здесь эти результаты не приводятся, поскольку выбор отношения $2a/d$ оказывает слабое влияние на условия генерации новой петли. Как видно из фиг. 3, с увеличением пройденного отщепившимся сегментом расстояния p [нм] (т. е., с ростом длины новой петли) изменение энергии ΔW может мо-

нотонно возрастать (кривые 1), убывать (кривые 4) или изменяться немонотонно – сначала расти, достигая точки максимума, а затем уменьшаться (кривые 2 и 3). Монотонно возрастающие кривые типичны для относительно малых значений приложенного напряжения τ , монотонно убывающие – для относительно больших значений τ , а немонотонные – для промежуточных значений τ . Увеличение угла α в пределах от 0 до $< 45^\circ$ не изменяет формы таких кривых, а лишь повышает “пограничные” уровни τ , отделяющие монотонные кривые от немонотонных.

Сопоставление графиков на фиг. 3,а,с и фиг. 3,б,д показывает, что зарождение петли полной решеточной дислокации является примерно на порядок более энергозатратным процессом, чем зарождение петли частичной решеточной дислокации. Естественно, что и выигрыш в энергии от зародившейся полной дислокации оказывается при этом примерно на порядок большим. В качестве критерия зарождения новой петли примем условия: $\Delta W(p = p^*) = 0$ и $\partial \Delta W / \partial p|_{p=p^*} < 0$, где $p^* = 1$ нм. Физически это означает следующее. Границы зерен и их тройные стыки в нанокристаллических материалах имеют характерную толщину порядка 1 нм. Атомные структуры границ и их стыков изучены пока недостаточно, но работы по их компьютерному моделированию демонстрируют высокую степень атомного разупорядочения [47, 48], что означает существенное локальное повышение плотности упругой энергии в области границы или стыка. Соответственно, их атомная структура уже изначально должна быть “готова” к тем локальным перестройкам, которые должны сопровождать зарождение там новой дислокационной петли. Поскольку явления на атомарном уровне недоступны для описания в рамках континуальной модели, можно потребовать только того, чтобы после выхода за пределы границы или тройного стыка толщиной 1 нм дальнейшее продвижение петли в глубь зерна сопровождалось понижением полной энергии системы, т. е. изменение энергии $\Delta W(p)$ должно быть отрицательным и возрастать по величине с ростом p при $p > p^*$. Таким условиям на фиг. 3 удовлетворяют кривые 3, которые определяют критический уровень внешнего напряжения τ_c , которого достаточно для гетерогенного зарождения петли решеточной дислокации. Естественно, что для зарождения полной дислокации требуется большее критическое напряжение (здесь $\tau_c \approx 3$ ГПа при $d = 5$ нм и ≈ 2.7 ГПа при $d = 50$ нм), чем для зарождения частичной (здесь $\tau_c \approx 1.8$ ГПа при $d = 5$ нм и ≈ 1.5 ГПа при $d = 50$ нм). Видно также, что τ_c оказывается меньше для большего размера исходной петли зернограничной дислокации и, соответственно, для большего размера зерна.

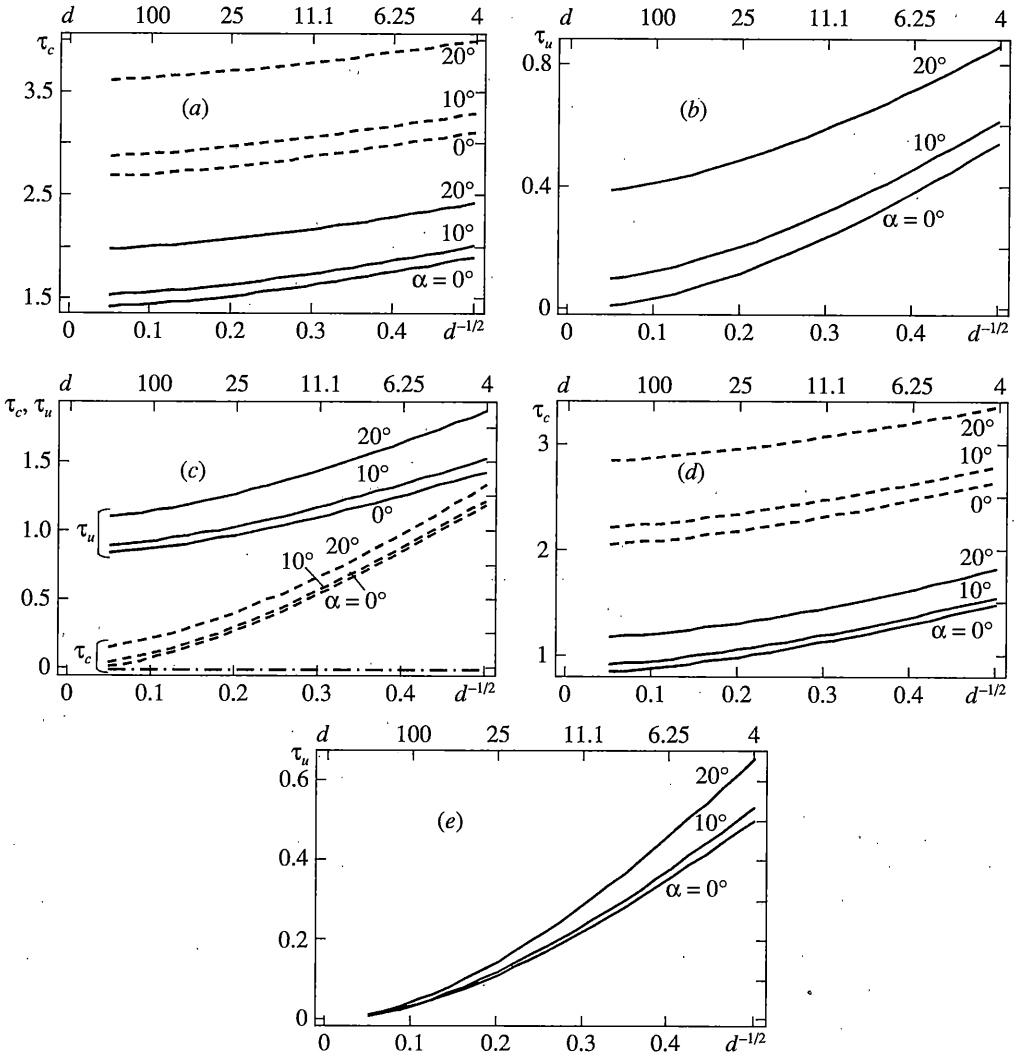
С помощью полученных выше формул и критического условия $\Delta W(p = p^*) = 0$ можно записать общее аналитическое выражение для τ_c в виде:

$$\tau_c = \frac{W_{s1} + W_{int} + \Delta W_c + W_f}{b_1 2ap \cos(2\alpha)} \Big|_{p=p^*} \quad (27)$$

где члены W_{s1} , W_{int} , ΔW_c и W_f определяются соответственно выражениями (8), (20), (24) и (25).

Зависимость критического напряжения τ_c от размера d исходной квадратной зернограничной петли представлена на фиг. 4,а для случаев зарождения петель частичной (сплошные линии) и полной (штриховые линии) дислокации при углах $\alpha = 0^\circ, 10^\circ$ и 20° . Видно, что в координатах Холла–Петча зависимость $\tau_c(d^{-1/2})$ близка к линейной. Для петель полных дислокаций τ_c оказываются примерно в 2 раза выше, чем для петель частичных. Значения τ_c сильно растут при уменьшении размера d и увеличении угла α . При больших значениях угла α зависимость $\tau_c(\alpha)$ сильно возрастает и стремится к бесконечности при $\alpha \rightarrow 45^\circ$ (эта область не рассматривается из-за ее нереалистичности).

Таким образом, можно сделать вывод, что на скользящих петлях зернограничных дислокаций могут зарождаться петли частичных решеточных дислокаций. Зарождение петель полных дислокаций требует существенно больших внешних напряжений. Зарождение петель частичных дислокаций должно происходить в первую очередь при малых



Фиг. 4

углах α , т.е. в плоскостях, близких по ориентации к плоскости исходной петли зернограничной дислокации. Новые дислокационные петли легче зарождаются на больших исходных петлях, уменьшение размера исходной петли (размера зерна) требует большего критического внешнего напряжения.

Заметим, что несмотря на то, что зарождение петель полных дислокаций оказывается сначала энергетически существенно менее выгодным, чем зарождение петель частичных дислокаций, дальнейшее распространение петель частичных дислокаций дает существенно меньший выигрыш в энергии, чем распространение уже зародившихся петель полных дислокаций. Это означает, что в зернах достаточного размера должна происходить последующая трансформация петель частичных дислокаций в петли полных (растянутых или даже локализованных) дислокаций. Этот вопрос уже выходит за рамки данной модели и требует специального изучения.

Аналогичным образом исследовались все остальные варианты гетерогенного зарождения дислокационных петель, показанные на фиг. 2. Основные результаты – зависимости критического напряжения зарождения петли от размера зерна для различных значений угла $\alpha = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ$ в чистом алюминии – даны на фиг. 4, *b–e*. Приведенные кривые соответствуют следующим ситуациям: (*b*) новая петля зернограничной дислокации зарождается на петле зернограничной дислокации; (*c*) новая петля решеточной дислокации зарождается на петле полной решеточной дислокации; (*d*) новая петля решеточной дислокации зарождается на петле частичной решеточной дислокации; (*e*) новая петля зернограничной дислокации зарождается на петле решеточной дислокации. Сплошные и штриховые – зарождению петель соответствуют зарождению петель частичных дислокаций, штриховые – зарождению петель полных дислокаций. На фиг. 4, *e* кривые для исходных петель частичных и полных дислокаций приблизительно совпадают.

Заметим, что на фиг. 4, *b, c, e* приведены графики предельного напряжения τ_u , которое имеет совсем другой смысл, чем τ_c . Дело в том, что в ряде случаев зарождение петель происходит безбарьерным путем, когда зависимость ΔW от длины p растущей b_1 -петли имеет вогнутую форму и характерный минимум при относительно низких значениях внешнего напряжения τ , когда $0 \leq \tau < \tau_u$, где τ_u – некоторое предельное напряжение, величина которого зависит от размера d и угла α . Это означает, что сегменту новой дислокации всегда энергетически выгодно отщепиться от краевого сегмента исходной петли и занять вблизи от последнего некоторое равновесное положение (точка минимума на кривых $\Delta W(p)$). Чем больше τ и d , тем дальше отстоит это равновесное положение от места расщепления. Можно сказать, что при $\tau < \tau_u$ расширение новой петли происходит в устойчивом равновесном режиме, когда ее равновесное положение контролируется уровнем приложенного напряжения τ . При $\tau = \tau_u$ происходит переход к режиму неустойчивого расширения, когда фиксацией уровня τ уже невозможно остановить рост петли (можно контролировать только скорость ее расширения). Таким образом, в этом случае критическое напряжение τ_c зарождения новой петли можно считать равным нулю, и исследовать только предельное напряжение τ_u перехода от устойчивого роста петли к неустойчивому.

В результате анализа различных сценариев гетерогенного зарождения новых скользящих дислокационных петель на уже существующих дислокационных петлях в деформированных нанокристаллических материалах (НКМ), можно сделать следующие основные выводы. Петли полных решеточных дислокаций весьма эффективны как источники петель зернограничных, частичных решеточных и полных решеточных дислокаций (в порядке убывания эффективности, которая определяется уровнем критического или предельного напряжения; чем меньше эти напряжения, тем эффективнее считается источник).

Петли частичных решеточных дислокаций весьма эффективны как источники петель зернограничных дислокаций, менее эффективны как источники петель частичных решеточных дислокаций и малоэффективны как источники полных решеточных дислокаций.

Петли зернограничных дислокаций эффективны как источники новых петель зернограничных дислокаций, существенно менее эффективны как источники петель частичных решеточных дислокаций и практически неэффективны как источники полных решеточных дислокаций.

В относительно крупнозернистых НКМ (условно, $d = 30\text{--}100$ нм), где возможна обычная внутризеренная дислокационная активность, наиболее эффективным (среди рассмотренных) источником новых петель являются петли полных решеточных дислокаций; в относительно мелкозернистых НКМ (условно, $d = 10\text{--}30$ нм), где обычная внутризеренная дислокационная активность существенно подавлена, наиболее эффективным источником новых петель остаются петли частичных решеточных дислокаций;

в ультрадисперсных НКМ (условно, $d = 3\text{--}10$ нм), где внутри зерен отсутствуют даже частичные решеточные дислокации, эффективным источником зернограницных петель могут служить зернограницные же дислокационные петли.

Таким образом, скольжение решеточных дислокаций может быть ведущим механизмом пластичности только в относительно крупнозернистых НКМ, где наиболее эффективными источниками новых дислокационных петель служат петли полных решеточных дислокаций. При этом решеточное скольжение стимулирует зернограницное скольжение. В относительно мелкозернистых НКМ обычное решеточное скольжение практически не реализуется, наиболее эффективными источниками новых дислокационных петель становятся петли частичных решеточных дислокаций и связанные с ними двойники, также стимулирующие зернограницное скольжение. В ультрадисперсных НКМ полностью доминирует зернограницное скольжение, петли зернограницных дислокаций являются эффективными источниками новых петель зернограницных дислокаций.

Заметим, что высокоскоростная сверхпластичность экспериментально наблюдалась в относительно крупнозернистых НКМ с размером зерна приблизительно от 50 до 100 нм [7, 29–32]. В этих экспериментах фиксировалось совместное действие таких сильно взаимодействующих между собой процессов пластичности как зернограницное скольжение, вращение зерен и скольжение решеточных дислокаций. Выше было показано, что петли полных решеточных дислокаций могут служить эффективными источниками для новых петель зернограницных дислокаций, тогда как последние не способны быть источниками ни для петель полных, ни для петель частичных решеточных дислокаций. Это означает, что решеточное скольжение в таких НКМ стимулирует зернограницное скольжение, тогда как зернограницное скольжение не может напрямую стимулировать решеточное. Можно полагать, что такое обратное взаимодействие между зернограницным и решеточным скольжением неизбежно должно включать некоторый промежуточный процесс, в роли которого может выступать ротационная деформация, как одна из основных составляющих высокоскоростной сверхпластической деформации в НКМ. Действительно, ротационная деформация стимулирует решеточное скольжение путем испускания решеточных дислокаций границами зерен [1–3, 19, 22, 34]. В то же время, ротационная деформация сама стимулируется зернограницным скольжением [1–3, 21]. Таким образом, при сверхпластической деформации в НКМ, включающей в себя механизмы решеточного скольжения, зернограницного скольжения и ротационной деформации, образуется петля положительной обратной связи, обеспечивающая высокие значения величины и скорости пластической деформации.

Работа выполнена при поддержке научной программы РАН “Структурная механика материалов и элементов конструкций. Взаимодействие нано-, микро-, мезо- и макромасштабов при деформировании и разрушении”, ИНТАС (грант 03-51-3779), Российского фонда фундаментальных исследований (грант 04-01-00211), программы Министерства науки и образования РФ по твердотельным наноструктурам, Фонда содействия отечественной науке и Санкт-Петербургского научного центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуткин М.Ю., Овидько И.А. Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов // Успехи механики. 2003. Т. 2. № 1. С. 68–125.
2. Гуткин М.Ю., Овидько И.А. Физическая механика деформируемых наноструктур. Т. 1. Нанокристаллические материалы. СПб: Янус, 2003. 194 с.
3. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials. Berlin: Springer, 2004. 198 p.
4. Mechanical Properties of Nanostructured Materials and Nanocomposites / Ed. Ovid'ko I., Pande C.S., Krishnamoorti R., Lavernia E., Skandan G. Warrendale, MRS Symp. Proc., 2004. V. 791.
5. Hahn H., Padmanabhan K.A. A model for the deformation of nanocrystalline materials // Philos. Mag. B. 1997. V. 76. № 4. P. 559–571.

6. Konstantinidis D.A., Aifantis E.C. On the "anomalous" hardness of nanocrystalline materials // Nanostruct. Mater. 1998. V. 10. № 7. P. 1111–1118.
7. Mukherjee A.K. An examination of the constitutive equation for elevated temperature plasticity // Mater. Sci. Eng. A. 2002. V. 322. P. 1–22.
8. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Strengthening mechanism for high-strain-rate superplasticity in nanocrystalline materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 2003. V. 36. № 12. P. L47–L5.
9. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Pande C.S. Yield stress of nanocrystalline materials: Role of grain boundary dislocations, triple junctions and Coble creep // Phil. Mag. 2004. V. 84. № 9. P. 847–863.
10. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Strengthening and softening mechanisms in nanocrystalline materials under superplastic deformation // Acta Mater. 2004. V. 52. № 6. P. 1711–1720.
11. Masumura R.A., Hazzledine P.M., Pande C.S. Yield stress of fine grained materials // Acta Mater. 1998. V. 46. № 13. P. 4527–4534.
12. Kim H.S., Estrin Y., Bush M.B. Plastic deformation behaviour of fine-grained materials // Acta Mater. 2000. V. 48. № 2. P. 493–504.
13. Yamakov V., Wolf D., Phillpot S.R., Gleiter H. Grain-boundary diffusion creep in nanocrystalline palladium by molecular-dynamics simulation // Acta Mater. 2002. V. 50. № 1. P. 61–73.
14. Fedorov A.A., Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Triple junction diffusion and plastic flow in fine-grained materials // Scr. Mater. 2002. V. 47. № 1. P. 51–55.
15. Fedorov A.A., Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Transformations of grain boundary dislocation pile-ups in nano- and polycrystalline materials // Acta Mater. 2003. V. 51. № 4. P. 887–898.
16. Ke M., Hackney S.A., Milligan W.W., Aifantis E.C. Observation and measurement of grain rotation and plastic strain in nanostructured metal thin films // Nanostruct. Mater. 1995. V. 5. № 6. P. 689–697.
17. Носкова Н.И. Физика деформации нанокристаллических металлов и сплавов // Нанокристаллические материалы / Под ред. В.В. Устинова, Н.И. Носковой. Екатеринбург: УрО РАН, 2002. С. 159–170.
18. Murayama M., Howe J.M., Hidaka H., Takaki S. Atomic-level observation of disclination dipoles in mechanically milled, nanocrystalline Fe // Science. 2002. V. 295. № 5564. P. 2433–2435.
19. Gutkin M.Yu., Kolesnikova A.L., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Disclinations and rotational deformation in fine-grained materials // Phil. Mag. Letters. 2002. V. 82. № 12. P. 651–657.
20. Ovid'ko I.A. Deformation of nanostructures // Science. 2002. V. 295. P. 2386.
21. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Crossover from grain boundary sliding to rotational deformation in nanocrystalline materials // Acta Mater. 2003. V. 51. № 14. P. 4059–4071.
22. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Disclinations and rotational deformation in nanocrystalline materials // Rev. Adv. Mater. Sci. 2003. V. 4. № 2. P. 79–113.
23. Ma E. Watching the nanograins roll // Science. 2004. V. 305. P. 623–624.
24. Shan Zh., Stach E.A., Wiezorek J.M.K., Knapp J.A., Follstaedt D.M., Mao S.X. Grain boundary-mediated plasticity in nanocrystalline nickel // Science. 2004. V. 305. P. 654–657.
25. Chen M., Ma E., Hemker K.J., Sheng H., Wang Y., Cheng X. Deformation twinning in nanocrystalline aluminum // Science. 2003. V. 300. № 5623. P. 1275–1277.
26. Liao X.Z., Zhou F., Lavernia E., Srinivasan S.G., Baskes M.I., He D.W., Zhu Y.T. Deformation mechanism in nanocrystalline Al: Partial dislocation slip // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 83. № 4. P. 632–634.
27. Liao X.Z., Zhou F., Lavernia E., He D.W., Zhu Y.T. Deformation twins in nanocrystalline Al // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 83. № 24. P. 5062–5064.
28. Liao X.Z., Zhou F., Srinivasan S.G., Zhu Y.T., Valiev R.Z., Gunderov D.V. Deformation twinning in nanocrystalline copper at room temperature and low strain rate // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. № 4. P. 592–594.
29. McFadden S.X., Mishra R.S., Valiev R.Z., Zhylyayev A.P., Mukherjee A.K. Low-temperature superplasticity in nanostructured nickel and metal alloys // Nature. 1999. V. 398. № 6729. P. 684–686.
30. Islamgaliev R.K., Valiev R.Z., Mishra R.S., Mukherjee A.K. Enhanced superplastic properties in bulk metastable nanostructured alloys // Mater. Sci. Eng. A. 2001. V. 304–306. P. 206–210.
31. Mishra R.S., Valiev R.Z., McFadden S.X., Islamgaliev R.K., Mukherjee A.K. High-strain-rate superplasticity from nanocrystalline Al alloy 1420 at low temperatures // Phil. Mag. A. 2001. V. 81. № 1. P. 37–48.
32. Valiev R.Z., Alexandrov I.V., Zhu Y.T., Lowe T.C. Paradox of strength and ductility in metals processed by severe plastic deformation // J. Mater. Res. 2002. V. 17. № 1. P. 5–8.

33. Valiev R.Z., Langdon T.G. An investigation of the role of intragranular dislocation strain in the superplastic lead-62% tin eutectic alloy // *Acta Metall.* 1993. V. 41. № 3. P. 949–954.
34. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Transformations of grain boundaries due to disclination motion and emission of dislocation pairs // *Mater. Sci. Eng. A.* 2003. V. 339. P. 73–80.
35. Bata V., Pereloma E. An alternative physical explanation of the Hall-Petch relation // *Acta Mater.* 2004. V. 52. № 3. P. 657–665.
36. Bobylev S.V., Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Decay of low-angle tilt boundaries in deformed nanocrystalline materials // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2004. V. 37. № 2. P. 269–272.
37. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Meshcheryakov Yu.I. Mechanisms of rotational effect in shock-loaded crystalline metallic materials // *J. Physique III (France)*. 1993. V. 3. № 8. P. 1563–1579.
38. Mura T. The continuum theory of dislocations // *Advances in Materials Research / Edited by H.Herman*, V. 3. New York/London/Sydney/Toronto: Interscience Publishers, 1968. P. 1–108.
39. Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids*. Dordrecht: Martinus Nijhoff, 1987, 587 p.
40. Gutkin M.Yu., Sheinerman A.G. Split and sealing of dislocated pipes at the front of a growing crystal // *Phys. stat. sol. (b)*. 2004. V. 241. № 8. P. 1810–1826.
41. Хирт Дж., Ломе И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972, 600 с.
42. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды: Элементарные функции. М.: Наука, 1981. 800 с.
43. Sutton A.P., Balluffi R.W. *Interfaces in Crystalline Materials*. Oxford: Clarendon Press, 1995. 819 p.
44. Yamakov V., Wolf D., Salazar M., Phillpot S.R., Gleiter H. Length-scale effects in the nucleation of extended lattice dislocations in nanocrystalline Al by molecular-dynamics simulation // *Acta Mater.* 2001. V. 49. № 14. P. 2713–2722.
45. Yamakov V., Wolf D., Phillpot S.R., Mukherjee A.K., Gleiter H. Dislocation processes in the deformation of nanocrystalline aluminium by molecular-dynamics simulation // *Nature Materials*. 2002. V. 1. P. 45–48.
46. Yamakov V., Wolf D., Phillpot S.R., Gleiter H. Deformation twinning in nanocrystalline Al by molecular dynamics simulation // *Acta Mater.* 2002. V. 50. P. 5005–5020.
47. Van Swygenhoven H., Derlet P.M. Grain-boundary sliding in nanocrystalline fcc metals // *Phys. Rev. B*. 2001. V. 64. № 22. Paper 224105.
48. Derlet P.M., Van Swygenhoven H. Atomic positional disorder in fcc metal nanocrystalline grain boundaries // *Phys. Rev. B*. 2003. V. 67. № 1. Paper 014202.

С.-Петербург

Поступила в редакцию
7.09.2004