

АККОМОДАЦИЯ ЗЕРНОГРАНИЧНОГО СКОЛЬЖЕНИЯ И ПОВЫШЕНИЕ ТРЕЩИНОСТОЙКОСТИ В ДЕФОРМИРУЕМЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

С.В. Бобылев^{1,2,3*}, И.А. Овидько^{1,2,3}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург 195251, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 198504, Россия

³Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург 199178, Россия

*e-mail: bobylev.s@gmail.com

Аннотация. В настоящем обзоре представлены теоретические модели механизмов аккомодации зернограничного скольжения в деформируемых наноматериалах. Описываемые механизмы являются специальными модами пластической деформации, а также ведут к повышению трещиностойкости. Рассмотрен механизм аккомодации зернограничного скольжения через стимулированное напряжением расщепление и миграцию границ зерен. Предложена теоретическая модель, описывающая влияние неаккомодированного и аккомодированного зернограничного скольжения на трещиностойкость наноматериалов. Также рассмотрена теоретическая модель специального механизма аккомодации, описывающего переход от пластического сдвига к ротационной деформации в нанокристаллических материалах.

1. Введение

Как известно, дислокационное скольжение подавлено в нанокристаллических металлах с очень малым размером зерна ($d < d' \approx 20$ нм) [1–6]. То же самое верно для нанокристаллических керамик с несколько большим размером зерна ($d < 100$ нм) и обычных поликристаллических керамик при сравнительно низких температурах, при которых барьер Пайерлса, препятствующий дислокационному скольжению, достаточно велик. Взамен в этих материалах активируются разнообразные моды зернограничной деформации [1–6] или двойниковой деформации [7–9]. Среди мод зернограничной деформации одним из ключевых механизмов считается межзеренное скольжение. В частности, экспериментально показано, что процессы межзеренного скольжения доминируют при сверхпластической деформации нанокристаллических металлов и керамик [1, 2]. Компьютерное моделирование [10, 11] также подтверждает ключевую роль межзеренного скольжения в пластической деформации наноматериалов особенно при высоких напряжениях и скоростях деформации (см. обзор [5]). Помимо этого, поведение некоторых нанокристаллических керамик в значительной степени обусловлено зернограничными процессами в аморфных границах зерен, часто наблюдаемых в этих материалах (см. экспериментальные данные [3] и компьютерное моделирование [12, 13]). Например, компьютерные модели [12, 13] эволюции нанокристаллического карбида кремния (3C-SiC) под механической нагрузкой показали, что пластическая деформация интенсивно протекает именно в аморфных границах.

Зернограничное скольжение представляет собой пластические сдвиги, которые локализованы в границах зерен и создают дефекты – источники внутренних напряжений – в тройных стыках границ зерен [1, 14]. Такие дефекты способны

инициировать зарождение нанотрещин [1, 14] и последующее хрупкое разрушение наноматериала [14]. Однако в материале параллельно с зернограничным скольжением могут развиваться процессы, называемые аккомодационными, роль которых сводится к тому, что созданные зернограничным скольжением дефекты трансформируются и перестают быть опасными источниками напряжений, что повышает пластичность наноматериала. Это обуславливает большой интерес к выявлению природы аккомодации зернограничного скольжения в наноматериалах с учетом особенностей их наноструктуры [1, 2]. К числу механизмов аккомодации зернограничного скольжения в наноматериалах относят эмиссию решеточных дислокаций из тройных стыков [1, 2], диффузию [15] и ротационную деформацию [16]. В настоящем обзоре рассматривается ряд теоретических моделей механизмов аккомодации зернограничного скольжения в наноматериалах. В частности, в п. 2 рассматривается механизм аккомодации зернограничного скольжения через стимулированное напряжением расщепление и миграцию границ зерен. При этом зернограничное скольжение, расщепление и миграция границ зерен реализуются совместно в виде кооперативного механизма деформации, обеспечивая эффективную взаимную аккомодацию. В п. 3 рассматривается теоретическая модель, описывающая влияние неаккомодированного и аккомодированного зернограничного скольжения (при низких и повышенных температурах соответственно) на рост трещин и, как следствие, трещиностойкость наноматериалов. В п. 4 описана теоретическая модель специального механизма аккомодации, описывающего переход от пластического сдвига к ротационной деформации в нанокристаллических материалах.

2. Механизм аккомодации зернограничного скольжения через стимулированное напряжением расщепление и миграцию границ зерен

Рассмотрим структурные трансформации, связанные с чистым зернограничным скольжением и совместным действием зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен в нанокристаллическом образце (рис. 1) как это изложено в [17]. Пусть образец состоит из наномасштабных зерен и находится под действием растягивающего напряжения. Двухмерный фрагмент рассматриваемого материала схематично изображен на рис. 1а. Сначала рассмотрим ситуацию, когда реализуется чистое зернограничное скольжение (рис. 1б,с). Согласно теории [15, 18] в результате такого скольжения могут образовываться диполи зернограничных дисклинаций. На рис. 1б и 1с схематично показана трансформация исходной конфигурации I границ зерен (рис. 1б) в конфигурацию II (рис. 1с) под действием приложенного напряжения τ . Эмиссия решеточных дислокаций из тройного стыка (рис. 1с) частично аккомодирует зернограничное скольжение, которое, в свою очередь, приводит к формированию дисклинационного диполя. Более подробно, в исходном состоянии (рис. 1б) тройной стык А является полностью скомпенсированным (т.е. сумма углов разориентировки границ, сходящихся в нем, равна нулю). В результате зернограничного скольжения формируется конфигурация II, в которой стыки А и С являются нескомпенсированными на величины ω и $-\omega$ соответственно [15, 18]. В данном случае ω – есть угол разориентировки границы АВ, которая полагается симметричной границей наклона. В теории дефектов нескомпенсированность стыков А и С моделируется клиновыми дисклинациями (в данном случае диполем), мощность которых в точности равна угловой невязке $\pm\omega$ в этих точках [19]. Плечо диполя АС равно величине x относительного смещения зерен (рис. 1с). Эта величина характеризует локальную пластическую деформацию вблизи рассматриваемого тройного стыка за счет зернограничного скольжения. Дисклинационный диполь АС в определенных условиях может стать очагом зарождения трещины [15, 18] (рис. 1д).

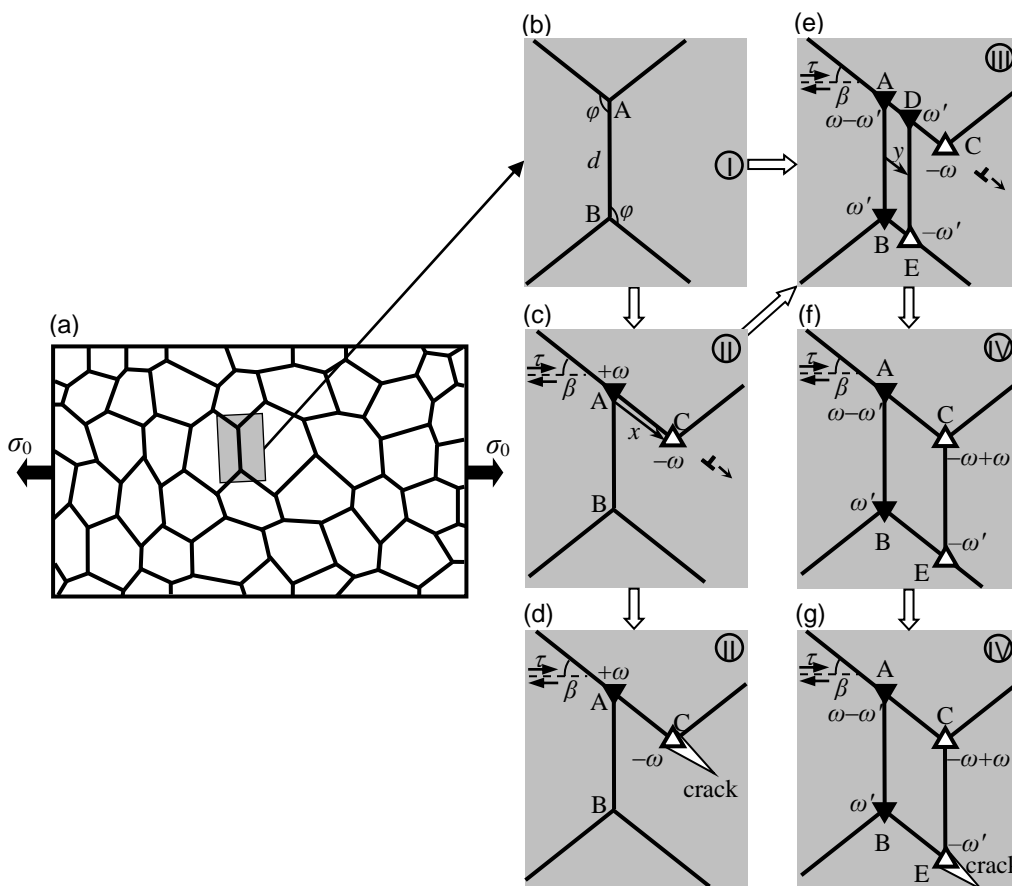


Рис. 1. Зернограничные деформационные процессы в нанокристаллическом образце. (а) Общий вид. (b) Начальная конфигурация границ зерен. (c),(d) Действие «чистого» зернограничного скольжения. (e)–(g) Совместное действие зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна (подробнее см. текст). Воспроизведено из [17] с разрешения American Physical Society.

Одновременно с пластическим течением за счет зернограничного скольжения и других механизмов, зачастую происходит деформационное измельчение зерен [20–25]. Деформационная нанокристаллизация обычно описывается как процесс непрерывной эволюции ансамбля дислокационных дефектов с образованием ячеистых структур и высокоугловых границ [1, 20]. В материалах под динамической нагрузкой при криогенных температурах измельчение зерен может осуществляться в процессе наномасштабной двойниковой деформации. Также эксперименты [21] и компьютерное моделирование [24, 25] показали, что зарождение нанозерен может реализовываться в процессе расщепления и миграции границ зерен. В теоретической работе [26] было сделано предположение, что этот процесс зарождения нанозерен является специальным режимом пластической деформации, осуществляющейся посредством индуцированных напряжением расщеплением и миграцией границ зерен.

В работе [17] было сделано предположение, что зернограничное скольжение и деформационное зарождение нанозерен (осуществляющееся через расщепление и миграцию границ зерен) могут реализовываться одновременно как кооперативный процесс, в котором дефекты, создаваемые зернограничным скольжением, частично аккомодируются дефектами, возникающими при зарождении нанозерен. Соответственно, совместное действие зернограничного скольжения и зарождения нанозерен является специальной модой пластической деформации, доминирующей в

определенном диапазоне параметров структуры над чистым зернограничным скольжением. Эта гипотеза находит подтверждение в теоретическом анализе, приведенном ниже, в экспериментальных данных [21, 22] и в численном моделировании [24, 25] деформационного зарождения нано- и микроскопических зерен на границах зерен и тройных стыках в поли- и нанокристаллических твердых телах в процессе пластической деформации.

Для простоты разделим рассматриваемый процесс совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна на две стадии. Под действием приложенного сдвигового напряжения τ на первой стадии происходит зернограничное скольжение, трансформирующее начальную конфигурацию I (рис. 1b) в конфигурацию II (рис. 1c). Как уже обсуждалось выше, эта трансформация ведет к образованию диполя клиновых дисклинаций AC (рис. 1c).

На второй стадии (рис. 1e) рассматриваемого процесса граница зерна AB расщепляется на два фрагмента: неподвижную границу (также обозначаемую AB) и подвижную границу DE, которые, для определенности полагаются симметричными границами наклона. Фрагмент DE под действием сдвигового напряжения τ мигрирует из исходного положения DE на расстояние y . Здесь для простоты рассматривается конфигурация, в которой при миграции границы зерна ее длина не изменяется, что реализуется, если границы AC и BE параллельны друг другу (или углы φ на рис. 1b одинаковы). Согласно теории [26] такие расщепление и миграция границы зерна приводят к следующим трансформациям дисклинаций: (1) дисклинация A, изначально имеющая мощность ω (рис. 1c) расщепляется на новую дисклинацию A с мощностью $\omega - \omega'$ и новую дисклинацию D с мощностью ω' (рис. 1e); (2) формируется еще один дисклинационный диполь BE с мощностью $\pm \omega'$ (рис. 1e). При этом мощность ω' равна углу разориентировки границы DE. Область ADEB представляет собой новое нанозерно, зарождение которого обусловлено миграцией границы DE (и соответствующим движением диполя DE), движение которой переносит пластическую деформацию.

В предельном случае может сформироваться конфигурация IV (рис. 1f) в которой остаются только два дисклинационных диполя AC и BE в результате слияния дисклинаций D и C. Помимо этого дисклинационные диполи, являющиеся мощными источниками механических напряжений, способны инициировать зарождение трещин, высвобождая часть упругой энергии, запасаемой этими диполями (рис. 1g).

Отметим, что рассматриваемый процесс (рис. 1) разделен на две стадии для наглядности; в реальности, в общем случае, зернограничное скольжение, расщепление и миграция границ зерен происходят одновременно (конфигурация I на рис. 1b трансформируется в конфигурацию III на рис. 1e). В ходе совместной реализации эти механизмы обеспечивают взаимную аккомодацию, что, как показано ниже, энергетически предпочтительнее реализации «чистого» зернограничного скольжения.

В работе [17] было найдено характеристическое изменение ΔW полной энергии системы при ее трансформации из начальной конфигурации I (рис. 1b) в конфигурацию III на рис. 1e. Последнюю конфигурацию, состоящую из пяти дисклинаций, удобно представить в виде комбинации трех дисклинационных диполей: AC (с мощностью $\pm(\omega - \omega')$), DC (мощность $\pm \omega'$) и BE (мощность $\pm \omega'$). Дисклинация C при этом представляется в виде суммы дисклинаций (с суммарной мощностью $-\omega$ в соответствии с рис. 1e), принадлежащих диполям AC и DC. В результате выражение для ΔW имеет следующий вид [17]:

$$\Delta W = \frac{D}{2} \sum_{i=1}^3 \omega_i^2 p_i^2 \left(\ln \frac{R}{p_i} + \frac{1}{2} \right) + \gamma_{gb} d - \tau d (x + \omega y \sin \varphi) \cos 2\beta +$$

$$+ \frac{D}{2} \sum_{i=1}^2 \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^3 \omega_i \omega_j \left(L_i^2 \ln \frac{R}{L_i} + L_j^2 \ln \frac{R}{L_j} - L_{ij}^2 \ln \frac{R}{L_{ij}} - q_i^2 \ln \frac{R}{q_i} + p_i p_j \right), \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} L_1 &= \sqrt{p_1^2 - 2p_1 q_1 \sin \alpha + q_1^2}, \quad L_2 = \sqrt{p_2^2 + 2p_2 q_1 \sin \alpha + q_1^2}, \\ L_3 &= \sqrt{p_3^2 + 2p_3 q_1 \sin \alpha + q_1^2}, \quad L_{ij} = \sqrt{(p_j - p_i)^2 + 2(p_j - p_i) q_i \sin \alpha + q_i^2}, \\ q_1 &= \sqrt{p_2^2 + 2p_2 d \cos \varphi + d^2}, \quad q_2 = 0, \quad \alpha = \varphi - \pi/2 - \arcsin(p_1 \sin \varphi / q_1), \\ p_1 &= y, \quad p_2 = x - y, \quad p_3 = x, \quad \omega_1 = \omega_2 = \omega', \quad \omega_3 = \omega - \omega'. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, R – радиус экранирования полей напряжений дисклинаций, γ_{gb} – удельная поверхностная энергия границы зерна, индексы 1, 2 и 3 относятся, соответственно, к диполям BE, DC и AC, x – смещение в результате зернограницного скольжения, y – расстояние миграции границы зерна, d – длина отрезка AB (см. рис. 1b), которую мы принимаем за размер зерна, угол φ показан на рис. 1a, β – угол между плоскостью действия максимальных сдвиговых напряжений и сегментом AC (рис. 1c). Для простоты расчета предполагается, что удельная поверхностная энергия границы зерна γ_{gb} не зависит от угла разориентировки и одинакова для обеих границ AB и DE.

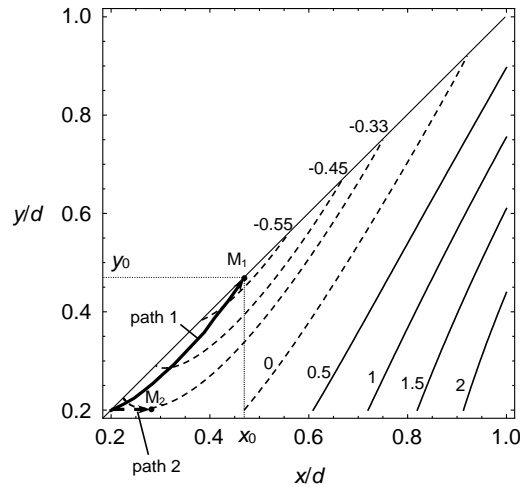


Рис. 2. Карты изменения энергии $\Delta W(x, y)$ в Ni, рассчитанные в диапазоне значений $2 \text{ нм} \leq x \leq d$ и $2 \text{ нм} \leq y \leq x$, для следующих значений параметров: $R = 3d$, $\varphi = 2\pi/3$, $\beta = 0$, $\tau = 0.05D$, $\omega = 0.3$, $\omega' = \omega/2$. Значения ΔW приведены в единицах $10^{-2} D d^2$. Воспроизведено из [17] с разрешения American Physical Society.

Формулы (1), (2) задают ΔW как функцию двух переменных x и y . Поэтому ее удобно анализировать с помощью двумерных карт энергии. На рис. 2a представлена типичная карта энергии ΔW (в единицах $10^{-2} D d^2$), рассчитанная на примере нанокристаллического Ni, для которого характерны следующие значения параметров: $G = 73 \text{ ГПа}$, $\nu = 0.34$ [27], $\gamma_{gb} = 0.866 \text{ Дж/м}^2$ [28]. Прочие параметры задачи полагались равными: $R = 3d$, $d = 10 \text{ нм}$, $\varphi = 2\pi/3$, $\beta = 0$, $\tau = 0.05D$, $\omega = 0.3$, $\omega' = \omega/2$. Из рис. 2 видно, что энергия ΔW имеет минимум в точке M_1 при некоторых значениях x_0 и y_0 ,

а энергетический барьер на пути 1 (path 1) из начальной точки в точку M_1 отсутствует, т.е. обсуждаемый процесс оказывается безбарьерным (по крайней мере в интервале $x, y > 2$ нм). При этом из рис. 2 видно, что $x_0 = y_0$, т.е. стабильной является конфигурация, показанная на рис. 1f. В итоге процесс совместной реализации зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна энергетически предпочтительнее чистого зернограничного скольжения (без миграции), который соответствует пути 2 (path 2) на рис. 2, и для которого энергетический минимум находится в точке M_2 .

В рассмотренном выше процессе представляется неочевидной роль расщепления границы зерна. Выясним насколько оно выгодно (и выгодно ли вообще) в сравнении с процессом совместной реализации зернограничного скольжения и миграции границы (без расщепления). С точки зрения выполненного выше расчета последний процесс является частным случаем механизма с расщеплением границы, который реализуется, если в формулах (1) и (2) положить $\gamma_{gb} = 0$ и $\omega' = \omega$. В работе [17] были рассчитаны карты энергии $\Delta W(x, y)$ для обоих механизмов в пространстве параметров (d, ω) и проведено сравнение уровней энергии в равновесных состояниях. Механизм с более низким уровнем энергии считался предпочтительным. На рис. 3 представлен график, рассчитанный для нанокристаллического Ni при $\tau = 0.05D$ и значений d и ω в следующих диапазонах: $5 \text{ нм} < d < 30 \text{ нм}$ и $0.1 < \omega < 1$. На этом графике показаны области (выделенные разным цветом), в которых доминирует тот или иной механизм. Хорошо видно, что в целом механизм совместного зернограничного скольжения и миграции границ зерен (без расщепления) более типичен, чем механизм совместного зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен, который доминирует в достаточно узком диапазоне мощностей ω вблизи значения $\omega \approx 0.25$.

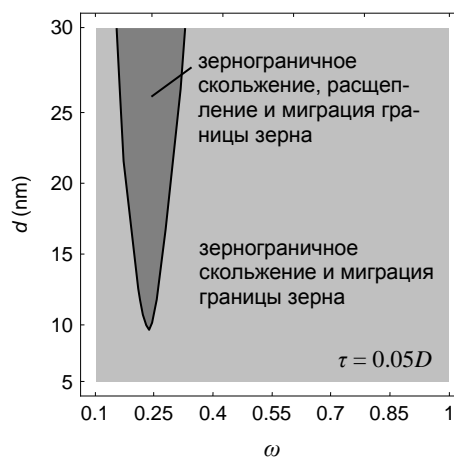


Рис. 3. График, показывающий рассчитанные для нанокристаллического Ni, деформируемого напряжением $\tau = 0.05D$, диапазоны параметров d и ω , в которых доминируют либо зернограничное скольжение и миграция границы зерна, либо зернограничное скольжение, расщепление и миграция.

С механизмами зернограничного скольжения и миграции границ зерен связана локальная пластическая деформация $\varepsilon^* = \varepsilon_{GBS} + \varepsilon_{mig}$, где ε_{GBS} — деформация зернограничного скольжения, ε_{mig} — деформация, задаваемая миграцией границ. Локальная деформация зернограничного скольжения в масштабах отдельного зерна определяется как $\varepsilon_{gbs} = x_0 / d$ [18]. Мигрирующая граница наклона с разориентировкой ω' задает деформацию $2 \tan(\omega' / 2)$ в той области материала, через которую она

прошла. Поскольку доля площади зерна, заматаемая движущейся ГЗ, равна y_0/d , средняя деформация в масштабах одного зерна $\varepsilon_{mig} = 2y_0 \tan(\omega'/2)/d$. Таким образом, $\varepsilon^* = [x_0 + 2y_0 \tan(\omega'/2)]/d$.

В реальном нанокристаллическом материале зерна ориентированы хаотически, т.е. отдельно взятые структурные элементы, подобные изображенному на рис. 1b, характеризуются случайным углом β ориентации относительно приложенного напряжения. Поэтому введем в рассмотрение усредненную по углу β пластическую деформацию:

$$\langle \varepsilon^* \rangle = (2/\pi) \int_0^{\pi/2} [(x_0 + 2y_0 \tan(\omega'/2))/d] d\beta, \quad (3)$$

где x_0 , y_0 определяются путем минимизации выражения (1) при заданных значениях τ , ω и ω' .

На рис. 4 приведены рассчитанные в [17] зависимости $\langle \varepsilon^* \rangle$ (сплошные линии) от приложенного напряжения τ при $d = 15$ нм, $\omega = 0.25$ и $\omega' = \omega/2$. Для сравнения также приведены кривые соответствующие усредненной деформации $\langle \varepsilon_{GBS} \rangle$ чистого зернограничного скольжения (пунктирные линии) и усредненной деформации $\langle \varepsilon_{CGBSM} \rangle$ механизма совместного зернограничного скольжения и миграции границы зерна (штрихпунктирные линии).

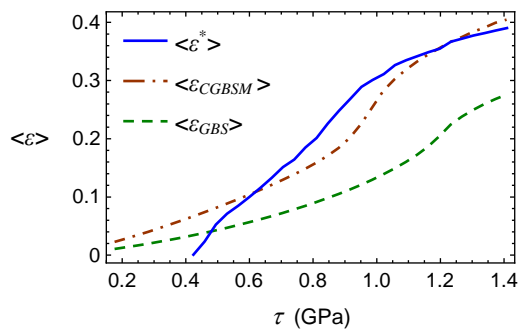


Рис. 4. Зависимости усредненной локальной пластической деформации в нанокристаллическом Ni от приложенного напряжения τ при $\omega = 0.25$ для разных механизмов деформации (см. текст). Прочие параметры имеют значения $R = 3d$, $\varphi = 2\pi/3$, $d = 15$ нм.

Зависимости $\langle \varepsilon \rangle(\tau)$ позволяют исследовать условия локализации пластического течения в нанокристаллическом образце деформируемого преимущественно по одному из трех механизмов, для которых построены кривые на рис. 4. Для этого мы использовали критерий Консидера (см., например, [29]), который гласит, что пластическое течение является нестабильным (т.е. локализуется в полосах сдвига), если выполняется условие $d\tau/d\varepsilon \leq \tau$. Анализ зависимостей $\langle \varepsilon^* \rangle(\tau)$, $\langle \varepsilon_{CGBSM} \rangle(\tau)$ и $\langle \varepsilon_{GBS} \rangle(\tau)$ показал, что этот критерий не выполняется ни при каких значениях ω в исследуемом случае нанокристаллического Ni. Т.е. материал деформируется однородно при условии доминирования любого из обсуждаемых здесь механизмов.

Учитывая, что пластичность нанокристаллических материалов обычно контролируется либо локализацией пластического течения, либо процессами трещинообразования [1, 29], в данном случае можно утверждать, что зарождение

трещин является главным процессом, ограничивающим пластичность материала. Таким образом, в первом приближении предположим, что пластичность материала задается некоторым критическим значением деформации ε_c , при котором зарождаются равновесные трещины. Используя вышеприведенные формулы, можно оценить критическую деформацию ε_c , что и было сделано в [17] на примере нанокристаллического Ni, при которой формируется стабильная трещина с длиной по меньшей мере 3 нм. Для механизма совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна было найдено, что $\varepsilon_c \approx 0.56$ при $\omega = 0.5$ и $\varepsilon_c \approx 0.26$ при $\omega = 0.7$. Более того, при $\omega < 0.4$ трещинообразование энергетически невыгодно (в обозначенных выше условиях) для реалистичных уровней приложенного напряжения. Для механизма чистого зернограничного скольжения (рис. 1d), используя результаты [18, 30], было найдено, что $\varepsilon_c \approx 0.13$ при $\omega = 0.5$ и $\varepsilon_c \approx 0.07$ при $\omega = 0.7$. Наконец для механизма совместного действия зернограничного скольжения и миграции границы зерна $\varepsilon_c \approx 0.18$ при $\omega = 0.5$ и $\varepsilon_c \approx 0.12$ при $\omega = 0.7$. Эти оценки позволяют сделать вывод, что механизм совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен обеспечивает больший рост пластичности и вязкости разрушения нанокристаллических и ультрамелкозернистых материалов по сравнению с механизмом совместного действия зернограничного скольжения и миграции границ зерен.

Таким образом, совместное действие зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен играет роль специального режима пластической деформации нанокристаллических материалов. Его составляющие – зернограничное скольжение и миграция границ зерен – способны эффективно аккомодировать друг друга путем трансформации зернограничных дисклинаций. В определенном диапазоне параметров (d, ω) зернограничных структур, подобных показанным на рис. 1, механизм совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен энергетически более выгоден по сравнению с чистым зернограничным скольжением или совместное действие зернограничного скольжения и миграции (без расщепления) границ зерен. Теоретически показано, что пластичность материала (оцениваемая по критической деформации ε_c , при которой формируется стабильная трещина с длиной не менее 3 нм) нанокристаллического Ni растет, если доминирует описываемый кооперативный механизм над чистым зернограничным скольжением или совместным зернограничным скольжением и миграцией (без расщепления). Результаты теоретического анализа (в частности, формирование нанозерен в районе тройных стыков) согласуются с экспериментальными данными [21, 22] и компьютерными моделями [24, 25] о наблюдении деформационного зарождения нано- и микроскопических зерен на тройных стыках.

3. Влияние неаккомодированного и аккомодированного межзеренного скольжения на рост трещин в нанокристаллических материалах

Межзеренное скольжение вблизи вершин трещин в нанокристаллических материалах. Перейдем к анализу влияния зернограничного скольжения на процесс подавления роста трещин, следуя работе [31]. Рассмотрим нанокристаллический образец, содержащий плоскую трещину, под действием растягивающей нагрузки (рис. 5). Предположим, что вершина трещины расположена в точности на границе зерна. Высокий уровень напряжений в окрестности вершины трещины может инициировать межзеренное скольжение (рис. 5). В свою очередь межзеренное проскальзывание может инициировать зарождение краевых дислокаций в тройных стыках. Рассмотрим

ситуацию, в которой скольжение происходит на участке границы от вершины трещины до тройного стыка и приводит к созданию краевой дислокации в этом стыке как показано на рис. 5. Дислокация создает напряжения, которые влияют на рост трещины. Этот процесс должен быть эффективен именно в нанокристаллических материалах, так как в них значительная доля объема приходится на границы зерен. Напротив, в обычных поликристаллах границ зерен существенно меньше, и влиянием межзеренного скольжения на рост трещин можно пренебрегать.

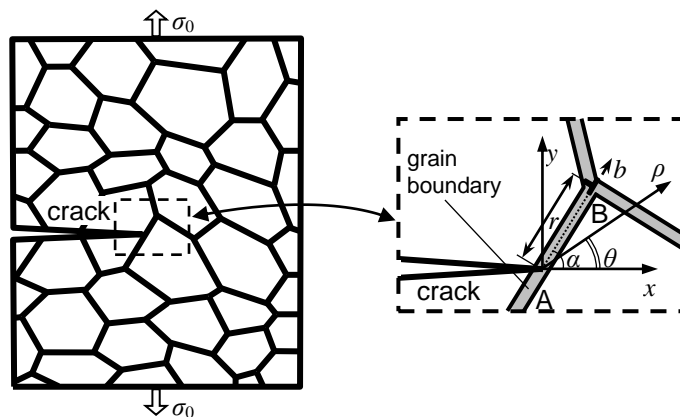


Рис. 5. Трещина в деформируемом нанокристаллическом образце. Выноска иллюстрирует генерацию краевой дислокации в тройном стыке границ зерен (или аморфных границ в керамике) вблизи вершины длинной трещины, пересекающей границу. Воспроизведено из [31] с разрешения Elsevier.

Межзеренное скольжение означает сдвиг соседних зерен относительно друг друга, локализованный в границе между ними. С макроскопической точки зрения такое скольжение реализуется либо посредством движения зернограницных дислокаций, либо локальных сдвиговых явлений [10, 32, 33]. Первый механизм типичен для скольжения вдоль границ зерен с трансляционно-упорядоченной структурой, которое эффективно описывается как движение скользящих зернограницных дислокаций с векторами Бюргерса параллельными плоскости границы [32, 33]. Локальные сдвиговые явления – это альтернативное описание межзеренного скольжения в поли- и нанокристаллах [10, 24, 32]. Эти явления представляют собой либо отдельные перескоки атомов, либо локальные трансформации групп атомов (кластеров) в зернограницной фазе. Этот подход базируется на теории [34] активируемых (термически и механически) локальных сдвиговых явлений в металлических стеклах. Поэтому можно ожидать, что описание межзеренного скольжения посредством локальных пластических сдвигов особенно эффективно для неравновесных границ зерен с неупорядоченной структурой и аморфных границ.

В предлагаемой модели величина вектора Бюргерса дислокации, возникающей в процессе межзеренного скольжения, постепенно возрастает в результате аккумуляции локальных сдвигов. Вектор Бюргерса при этом параллелен плоскости границы. Подобные дефекты не являются классическими решеточными дислокациями, однако они могут рассматриваться как дислокации в смысле теории Вольтерра [27, 35]. Т.е. как источники внутренних напряжений, подобных дислокационным, в упругом континууме. Таким образом, подобные дислокации обычно неподвижны и располагаются на границе между деформированной и недеформированной областями. В нашем случае в тройном стыке, так как предполагается, что пластическая деформация локализована внутри границы зерна.

В общем случае, можно говорить о протекании межзеренного скольжения вблизи вершины трещины как о неаккомодированном или аккомодированном процессе. Неаккомодированное межзеренное скольжение осуществляется при сравнительно низких температурах, при которых подавлена зернограничная диффузия ($T < T_{GBD} = 0.3T_m$, где T_m – температура плавления [36]). В этом случае межзеренное скольжение просто приводит к генерации дислокации Вольтерра (рис. 5). В тоже время, скольжение может протекать одновременно с такими аккомодационными процессами как диффузионное переползание зернограничных дислокаций, эмиссия дислокаций в тело зерна. Аккомодированное диффузионными процессами межзеренное скольжение интенсивно протекает в диапазоне температур $T_{GBD} < T < T_{GG}$, где T_{GG} – температура, при которой начинается интенсивный рост зерен, уничтожающий нанокристаллическую структуру. Дислокационная эмиссия в тело зерен должно быть эффективной в материалах с облегченным решеточным скольжением, т.е. в металлах с низким барьером Пайерлса в широком диапазоне температур и керамиках при высоких температурах. Предлагаемая модель генерации дислокаций в тройных стыках и их трансформация в решеточные дислокации находит подтверждение в экспериментальных данных [37] по наблюдению дислокационной эмиссии из тройных стыков в нанокристаллическом Ni и схожих наблюдениях, основанных на результатах компьютерного моделирования [38, 39].

Основной эффект неаккомодированного межзеренного скольжения на рост трещин – это частичное высвобождение упругой энергии, сконцентрированной вблизи вершины трещины, за счет образования дислокации в ближайшем тройном стыке. Аккомодированное межзеренное приводит к затуплению вершин трещин. Оба процесса затрудняют рост трещин и увеличивают трещиностойкость материала. Они подробно рассмотрены ниже.

Влияние неаккомодированного межзеренного скольжения на трещиностойкость нанокристаллических металлов и керамик при низких температурах. Рассмотрим нанокристаллический образец, содержащий длинную плоскую трещину длиной l , под действием растягивающей нагрузки при низкой температуре ($T < T_{GBD}$). Типичный фрагмент структуры образца схематически показан на рис. 5. Пусть трещина пересекает границу зерна в точке, удаленной на расстояние r_0 ($r_0 \ll l$) от ближайшего тройного стыка (рис. 5). Локальные напряжения вблизи вершины трещины инициируют межзеренное проскальзывание вдоль границы АВ (рис. 5) и прочих границ. Тройные стыки являются естественными геометрическими препятствиями для процессов межзеренного скольжения (см., например, [40–42]. В частности, тройной стык В препятствуют скольжению вдоль пути АВ (рис. 5), так как условия для дислокационного скольжения (ориентация плоскости скольжения, величина вектора Бюргерса решеточных дислокаций, напряжение Пайерлса и т.д.) в зерне I значительно отличаются от условий деформации внутри границы АВ. В результате незавершенный сдвиг аккумулируется в тройном стыке В [40–42]. В терминах теории дефектов это означает, что тройной стык В содержит дислокацию, величина вектора Бюргерса которой постепенно возрастает по мере нарастания сдвига, обусловленного межзеренным скольжением [41].

В данном подразделе мы рассмотрим ситуацию, когда дислокации в тройном стыке остаются неподвижными, что, как уже обсуждалось, реализуется, если напряжения Пайерлса для решеточных дислокаций очень высоки и деформация протекает при низкой гомологической температуре ($T < T_{GBD} = 0.3T_m$), при которой подавлены диффузионные процессы. Таким образом, предельное значение b_c величины

вектора Бюргера дислокации в тройном стыке контролируется внешним напряжением. Следуя оценкам, полученным в [31], значение b_c варьируется в пределах от 0.1 до 0.6 нм в зависимости от материала.

Оценим влияние дислокации в тройном стыке на трещиностойкость нанокристалла. В рамках макроскопического механического описания эффект от локальной пластической деформации на рост трещины может быть учтен путем введения эффективного коэффициента интенсивности напряжений K_{IC}^* [31]. В работе [31] коэффициент K_{IC}^* найден в следующем виде:

$$K_{IC}^* = (-Q + \sqrt{Q^2 - 4PR})/2P, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} P &= 8(\ln(r_0/r_c) + 1)^2 - \sin^2 \theta \cos^2(\theta/2)[24 \ln(r_0/r_c) + 3 \cos 2\theta - 4 \cos \theta + 17], \\ Q &= 2\tau_0 \sqrt{2\pi r_0} \sin \theta \cos^2(\theta/2)[12 \ln(r_0/r_c) + 3 \cos 2\theta - 4 \cos \theta + 5], \\ R &= 8\pi r_0 \tau_0^2 \cos^2(\theta/2)[5 - 3 \cos \theta] - 64\pi D\gamma(\ln(r_0/r_c) + 1)^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь r_0 – расстояние от вершины трещины до дислокации, r_c – радиус ядра дислокации, θ – угол между плоскостью границы и осью Oх, τ_0 – некоторое пороговое значение сдвигового напряжения для активации межзеренного скольжения (в этом приближении фактически считается, что пластический сдвиг в границе зерна происходит, если локальные напряжения $\geq \tau_0$ в каждой точке границы зерна), γ – удельная (в расчете на единицу площади) поверхностная энергия.

Рассчитаем эффективный коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* на примере нанокристаллических металлов Al и Ni, а также керамики 3C–SiC (кубическая фаза карбида кремния). Типичные значения параметров G , ν и γ для этих материалов приводятся ниже. Для Ni: $G = 73$ ГПа, $\nu = 0.34$ и $\gamma = 1.725$ Дж/м² [27], для Al: $G = 27$ ГПа, $\nu = 0.34$ и $\gamma = 1$ Дж/м² [27], для 3C–SiC: $G = 217$ ГПа, $\nu = 0.23$ [43] и $\gamma = 1.5$ Дж/м² [44]. Радиус ядра дислокации положим равным $r_c \approx 0.1$ нм для всех материалов.

Согласно формулам (4) и (5) эффективный коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* зависит от порогового напряжения τ_0 межзеренного скольжения. В металлах значение τ_0 обычно очень низкое. Например, в Al напряжение τ_0 не превосходит 4 МПа [45]. Поэтому для простоты положим $\tau_0 = 0$ в Al и Ni. Из (4), (5) в случае $\tau_0 = 0$ мы находим, что отношение $K_{IC}^*/K_{IC} = 2\sqrt{2/P}[\ln(r_0/r_c) + 1]$, где $K_{IC} = \sqrt{4G\gamma/(1-\nu)}$ – коэффициент интенсивности в случае хрупкого разрушения (в отсутствие дислокаций), не зависит от материальных констант G , ν и γ . Другими словами, это отношение практически идентично для всех материалов (в основном, металлов) с низким значением порогового напряжения τ_0 .

В случае нанокристаллической керамики 3C–SiC с аморфными границами зерен мы полагаем $\tau_0 = \tau_a$, где τ_a напряжение течения аморфной фазы SiC. В общем случае τ_a сильно чувствительно к температуре и скорости деформации. Для очень низких температур (близких к $T = 0$ К) и/или высоких скоростей деформации реализуется атермическая пластическая деформация. Согласно экспериментам [46] микротвердость H_V аморфного SiC около 30 ГПа. Учитывая стандартное феноменологическое

соотношение $\tau_f \approx H_V / 6$ между H_V и напряжением течения τ_f [47], напряжение течения $\tau_a = 5$ ГПа для аморфного SiC. Напряжение течения существенно снижается с ростом температуры и/или понижением скорости деформации, т.е. при переходе к термически активируемому течению. В последующем рассмотрении, касающемся термически активируемой деформации, для определенности будем полагать $\tau_a = 1$ ГПа.

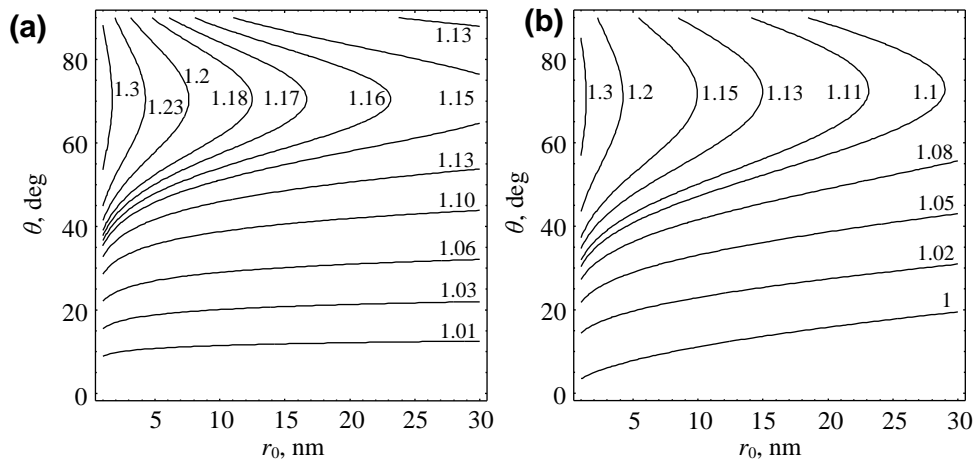


Рис. 6. Карты уровней отношения K_{IC}^* / K_{IC} (как функции угла θ и расстояния r_0 между вершиной трещины и дислокацией) в случае краевой дислокации расположенной возле вершины трещины в (a) Al или Ni и (b) SiC. Воспроизведено из [31] с разрешения Elsevier.

Зависимости отношения K_{IC}^* / K_{IC} от угла θ и дистанции r_0 между дислокацией и вершиной трещины представлены в виде карты уровней на рис. 6 для Al и Ni (рис. 6a) и 3C-SiC (рис. 6b). Карта на рис. 6a описывает не только Al и Ni, но и любой другой материал, характеризующийся низким значением порогового напряжения τ_0 . Из этого рисунка вытекает, что локальный коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* достигает максимального значения, когда плоскость границы составляет угол приблизительно равный 70° с направлением роста трещины. Это связано с тем, что в этом направлении напряжение $\sigma_{r\theta}$ максимально. Также из рис. 6 следует, что формирование дислокации ведет к увеличению K_{IC}^* на $\approx 30\%$, когда $r_0 \approx 1$ нм. Эффект значителен, однако резко спадает с увеличением r_0 для 3C-SiC. Для Al и Ni увеличение K_{IC}^* спадет более плавно с ростом r_0 . В общем случае, можно сделать вывод, что дислокационное влияние на коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* сильнее в металлах, чем в керамиках с аморфными границами. Очевидно, что причина кроется в пороговом напряжении сдвига τ_0 , которое достаточно велико в керамиках.

Вместо коэффициентов интенсивности напряжений трещиностойкость также можно описывать в терминах напряжений и длин трещин. Известно, что длина трещины l находится в следующей зависимости с коэффициентом интенсивности [48]: $K_I^\sigma = \sigma_0 \sqrt{\pi l / 2}$. Соответственно результаты вычислений можно легко переформулировать, если предположить, что длина трещины достаточно велика ($l \gg r_0$). Положим $l = 100$ нм. Для этого значения критическое напряжение σ_{c0} необходимое для активации катастрофического роста трещины в бездислокационном

случае (хрупкое разрушение) задается как: $\sigma_{c0} = \sqrt{8G\gamma / [(1-\nu)\pi l]}$. Значение $\sigma_{c0} \approx 1$ ГПа для Al, ≈ 2.2 ГПа для Ni и ≈ 3.3 ГПа для 3C-SiC. Формирование дислокации (рис. 5) приводит к увеличению критического напряжения σ_c на 10–30 % (рис. 6). Например, в Al при $\theta = 70^\circ$ имеем: $\sigma_c \approx 1.30$ ГПа при $r_0 = 2$ нм; $\sigma_c \approx 1.23$ ГПа при $r_0 = 5$ нм; $\sigma_c \approx 1.20$ ГПа при $r_0 = 10$ нм. В Ni при $\theta = 70^\circ$ получаем: $\sigma_c \approx 2.83$ ГПа при $r_0 = 2$ нм; $\sigma_c \approx 2.69$ ГПа при $r_0 = 5$ нм; $\sigma_c \approx 2.62$ ГПа при $r_0 = 10$ нм. Наконец, в 3C-SiC при $\theta = 70^\circ$: $\sigma_c \approx 4.1$ ГПа при $r_0 = 2$ нм; $\sigma_c \approx 3.9$ ГПа при $r_0 = 5$ нм; $\sigma_c \approx 3.8$ ГПа при $r_0 = 10$ нм.

Таким образом, неаккомодированное межзеренное скольжение в нанокристалле вблизи вершины трещины приводит к формированию дислокации в ближайшем тройном стыке. Упругие поля напряжений этой дислокации частично компенсируют высокие напряжения, сконцентрированные вблизи вершины трещины, что несколько затрудняет рост трещины.

Затупление трещины как результат аккомодированного межзеренного скольжения и его влияние на трещиностойкость наноматериалов при средних температурах. Рассмотрим ситуацию, когда межзеренное скольжение вблизи вершины трещины эффективно аккомодируется посредством зернограницных диффузионных процессов. Более конкретно, посредством переползания зернограницных дислокаций. Обычно этот механизм начинает играть существенную роль при промежуточных гомологических температурах, когда зернограницная диффузия становится достаточно активной, но все же недостаточно интенсивной, так что рост зерен (уничтожающий нанокристаллическую структуру) остается подавленным. Зернограницная диффузия активирует переползание зернограницных дислокаций, которое способно аккомодировать межзеренное скольжение [31]. Альтернативный сценарий аккомодации межзеренного скольжения вблизи вершины трещины может основываться на эмиссии решеточных дислокаций из тройного стыка в тело зерна, которая также активизируется за счет диффузионного переползания зернограницных дислокаций [31]. Аккомодация межзеренного скольжения переползанием зернограницных дислокаций (с эмиссией решеточных дислокаций или без) может вызывать значительное затупление вершины трещины, и, следовательно, серьезно влиять на рост трещины. Ниже мы рассмотрим ситуацию, в которой затупление трещины играет доминирующую роль в затруднении роста трещины, и оценим влияние затупления на трещиностойкость нанокристаллических металлов.

Для этого воспользуемся подходом, предложенным Белтцем и др. [49]. Следуя [49, 50], представим трещину в виде удлиненного эллипса с радиусом кривизны ρ в вершине трещины, который много меньше длины трещины (рис. 7). Также, следуя [49], предположим, что рост затупленной трещины возможен, если растягивающее напряжение σ_{ip} в вершине трещины, нормальное к ее плоскости, достигает некоторого критического значения σ_p ($\sigma_{ip} = \sigma_p$). Напряжение σ_{ip} в вершине трещины задается следующей формулой [51]:

$$\sigma_{ip} = 2K_I^\sigma / \sqrt{\pi\rho}, \quad (6)$$

где K_I^σ – обобщенный коэффициент интенсивности напряжений [50] в предположении, что эллипс заменен на острую трещину с переносом вершины в центр кривизны.

В рамках макроскопического описания, игнорирующего детали процессов в вершине трещины, трещина растет, если $K_I^\sigma = K_{IC}^*$. Объединяя это соотношение с условием

$\sigma_{ip} = \sigma_p$ и формулой (6), получаем:

$$K_{IC}^* = \sigma_p \sqrt{\pi\rho} / 2. \quad (7)$$

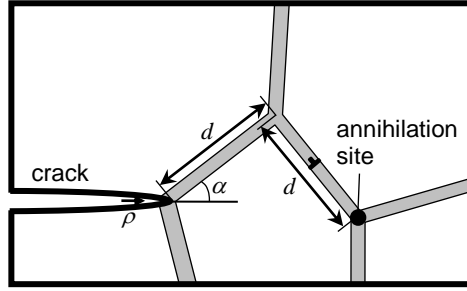


Рис. 7. Переползание дислокаций вблизи вершины затупленной трещины. Воспроизведено из [31] с разрешения Elsevier.

Формула (7) верна, при условии, если ρ больше некоторого критического радиуса ρ_c , при котором вершина трещины может рассматриваться скругленной. Если же $\rho = 0$ (острая трещина), будем использовать формулу (см. выше) $K_{IC}^* = \sqrt{4G\gamma / (1-\nu)}$.

Следуя [49], определим ρ_c равенством

$$\sqrt{4G\gamma / (1-\nu)} = \sigma_p \sqrt{\pi\rho_c} / 2, \quad (8)$$

которое дает: $\rho_c = 16G\gamma / [\pi(1-\nu)\sigma_p^2]$, и положим

$$K_{IC}^* = \begin{cases} \sqrt{4G\gamma / (1-\nu)}, & \rho < \rho_c, \\ \sigma_p \sqrt{\pi\rho} / 2, & \rho > \rho_c. \end{cases} \quad (9)$$

Величина K_{IC}^* связана с пластической деформацией ε следующим соотношением, найденным в [31]:

$$K_{IC}^* = \max \left\{ \frac{\pi\sigma_p^2 b^4 D_{GB} f(\alpha) \sin \alpha}{8d^2 \sqrt{2\pi d} kT \dot{\varepsilon}} \varepsilon, \sqrt{4G\gamma / (1-\nu)} \right\}, \quad (10)$$

где D_{GB} – коэффициент зернограницной диффузии, h – расстояние переползания до места аннигиляции, T – абсолютная температура, k – постоянная Больцмана. Функция $f(\alpha)$ задается как

$$f(\alpha) = \int_0^1 (u^2 + 1)^{-1/4} \cos(\theta_0 / 2) [1 + \sin(\theta_0 / 2) \sin(2\alpha - 3\theta_0 / 2)] du, \quad (11)$$

где $\theta_0 = \alpha - \arctan u$.

Оценим K_{IC}^* на примере Al. Для этого материала воспользуемся следующими значениями параметров: $\sigma_p = 9.06$ ГПа, $\gamma = 0.56$ Дж/м² [49]. Также положим $\alpha = \pi / 6$ и $d = 15$ нм. Коэффициент диффузии D_{GB} вычислим с помощью формулы Аррениуса [32]: $D_{GB} = D_{b0} \exp[-Q_b / (RT)]$. Здесь R – универсальная газовая постоянная, а активационная энергия Q_b зернограницной диффузии и предэкспоненциальный фактор D_{b0} имеют следующие значения [52]: $Q_b = 46.2$ кДж/моль и $D_{b0} = 2.2 \cdot 10^{-9}$ м²/с.

Зависимости $K_{IC}^*(\varepsilon)$ показаны на рис. 8 для разных значений температуры T и скорости деформации $\dot{\varepsilon}$. Как следует из рис. 8, для относительно высоких температур и малых скоростей деформации (кривые 1, 2 и 3) дислокационное переползание очень эффективно аккомодирует межзеренное скольжение. Это приводит к значительному затуплению трещины и, как следствие, может приводить к существенному росту трещиностойкости. Например, при $\varepsilon=0.03$, рост коэффициента K_{IC}^* благодаря затуплению составляет 155 % и 26 % в случаях, показанных кривыми 1 и 2 соответственно. Эти значения K_{IC}^* соответствуют радиусам ρ вершины трещины 9.3 нм и 2.3 нм. В терминах напряжений, для значений $\varepsilon=0.03$ и длины трещины $l=400$ нм, значениям K_{IC}^* для случаев, показанных кривыми 1, 2 и 3 соответствуют значения критического напряжения $\sigma_{0c} = K_{IC}^* / \sqrt{\pi l / 2}$ равные 977 МПа, 482 МПа и 381 МПа. В частности, $\sigma_{0c} = 977$ МПа значительно выше типичных значений напряжения течения нанокристаллического Al. В то же время, для низких температур и/или высоких скоростей деформации дислокационное переползание оказывается слишком медленным для эффективной аккомодации межзеренного скольжения, так что рост трещиностойкости оказывается незначительным (см. кривую 4 на рис. 8).

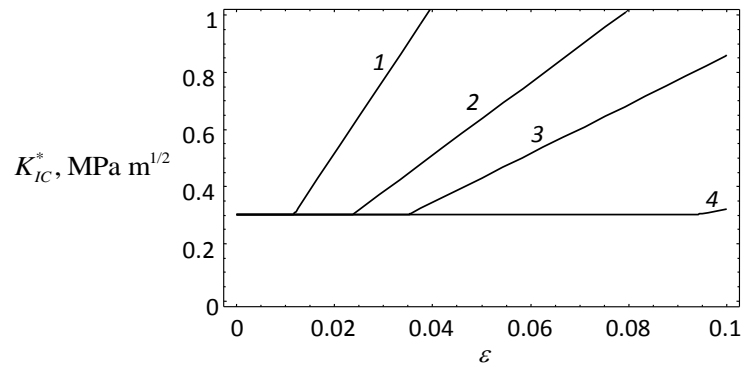


Рис. 8. Зависимости $K_{IC}^*(\varepsilon)$ для $T=323$ К и $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}$ с $^{-1}$ (кривая 1), $T=353$ К и $\dot{\varepsilon} = 8 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$ (кривая 2), $T=323$ К и $\dot{\varepsilon} = 3 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$ (кривая 3), $T=323$ К и $\dot{\varepsilon} = 8 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$ (кривая 4).

Как следует из формулы (10), если $K_{IC}^* > K_{IC}$, то критическое значение коэффициента интенсивности напряжений K_{IC}^* быстро падает с увеличением размера зерна d ($K_{IC}^* \sim d^{-5/2}$). Зависимости K_{IC}^* от размера зерна d для нанокристаллического Al, деформируемого при $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}$ с $^{-1}$ и разных температурах T показаны на рис. 9 для значения $\varepsilon=0.03$. Рис. 9 четко демонстрирует, что влияние затупления трещины на коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* существенно только в диапазоне малых размеров зерен (если размер зерна d меньше некоторого критического значения d_c). При $d = d_c$ коэффициент интенсивности напряжений достигает предельного значения K_{IC} , соответствующего хрупкому разрушению, и далее не растет. С ростом температуры T критический размер зерна d_c также растет, так что при заданном размере зерна d увеличение K_{IC}^* с уменьшением d становится более выраженным. Увеличение размера зерна d замедляет переползание зернограницных дислокаций, так что они не могут полностью аккомодировать межзеренное проскальзывание, и, как следствие, затуплять трещину.

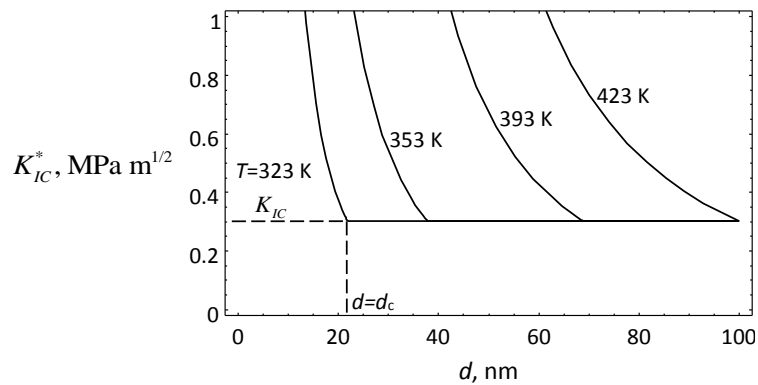


Рис. 9. Зависимость критического коэффициента интенсивности напряжений K_{IC}^* в нанокристаллическом Al от размера зерна d .

Результаты. Таким образом, несмотря на то, что большинство наноматериалов имеют низкую пластичность и трещиностойкость [2–6], некоторые нанокристаллические керамики [3, 53, 54] и нанокристаллический Ni [55] демонстрируют повышенную трещиностойкость в сравнении с поликристаллами. Повышение трещиностойкости может быть объяснено специфическими упрочняющими механизмами, оперирующими в этих наноматериалах (благодаря большому количеству границ зерен и наномасштабным эффектам) и способными "замещать" стандартное упрочнение посредством дислокационной эмиссии из вершин трещин. Мы рассмотрели теоретические модели, описывающие один такой упрочняющий механизм, а именно: упрочнение посредством неаккомодированного и аккомодированного межзеренного скольжения в наноматериалах при низких и средних температурах соответственно. В рамках первой модели неаккомодированное межзеренное скольжение вблизи вершин трещин при сравнительно низких температурах приводит к созданию неподвижных некристаллографических дислокаций Вольтерра в тройных стыках границ зерен (рис. 5). Для нанокристаллических Al, Ni и 3C–SiC, используя силовой критерий роста трещин, было вычислено, что эффективный коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* (фактически трещиностойкость) возрастает на величину $\sim 30\%$ благодаря дислокации, создаваемой неаккомодированным межзеренным скольжением тройном стыке, если расстояние r_0 между дислокацией и вершиной трещины порядка 1 нм. Эффект значителен, однако увеличение K_{IC}^* стремительно спадает с увеличением r_0 в SiC (рис. 6b). В нанокристаллических Al и Ni то же увеличение K_{IC}^* спадает более плавно с ростом r_0 (рис. 6a). Чувствительность коэффициента интенсивности напряжений к расстоянию r_0 (рис. 6) коррелирует с чувствительностью к размеру зерна d , поскольку вероятность обнаружить тройной стык вблизи вершины трещины тем больше, чем меньше размер зерна. А в наноматериалах с очень малым размером зерна, где трещины обычно растут вдоль границ зерен, r_0 фактически и будет размером зерна. С учетом вышесказанного, роль межзеренного скольжения как особого механизма упрочнения ярко выражена в нанокристаллических металлах и керамиках.

В случае более высоких температур межзеренное скольжение эффективно аккомодируется диффузионным переползанием зернограницных дислокаций и эмиссией решеточных дислокаций в тело зерна. Аккомодированное межзеренное скольжение может приводить к значительному затуплению вершин трещин, что, в свою очередь, значительно (от 1.1 до 3 раз в зависимости от температуры) повышает

трещиностойкость. Этот эффект наиболее ярко выражен в наноматериалах с очень малым размером зерен и существенно ослабевает с ростом размера зерна d (рис. 9). То есть рассмотренный эффект аккомодированного межзеренного скольжения является специфическим механизмом именно в нанокристаллических материалах и не актуален для крупнозернистых поликристаллов.

В свете результатов настоящей работы находит объяснение экспериментально наблюдаемое различие в разрушении нанокристаллических материалов, часть из которых является устойчивыми к росту трещин, тогда как большинство – хрупкие. Причина этого поведения – эффективное или неэффективное замещение стандартного упрочняющего механизма (через испускание решеточных дислокаций из вершин трещин, доминирующее в обычных поликристаллах) альтернативными механизмами (в частности, межзеренным скольжением) в нанокристаллических материалах. Если альтернативный механизм способен интенсивно работать в нанокристаллическом образце, то последний будет демонстрировать повышенную трещиностойкость. Напротив, нанокристалл будет иметь низкую трещиностойкость, если альтернативный механизм не способен эффективно заместить обычный упрочняющий механизм.

Обсуждаемое различие в разрушении нанокристаллических материалов хорошо иллюстрируется экспериментальными данными [55], касающимися роста трещин в нанокристаллических образцах из Ni (с размером зерна около 20 нм), изготовленных в разных условиях. Так Миршамс и др. [55] обнаружили, что сопротивление росту трещин в фольгах нанокристаллического Ni при комнатной температуре для неотожженных образцов и образцов, подвергавшихся отжигу при 373 К, превосходит таковое для крупнозернистого поликристаллического Ni. Напротив, после отжига при 473 К нанокристаллический Ni демонстрирует низкое сопротивление росту трещин по сравнению с крупнозернистым Ni. Эти экспериментальные данные естественным образом объясняются чувствительностью межзеренного скольжения (и других упрочняющих зернограничных механизмов) к структуре границ зерен. Границы в не подвергавшихся термообработке нанокристаллических металлах обычно сильно неравновесные [1, 56, 57]. Они содержат большое количество избыточных зернограничных дислокаций, что значительно облегчает межзеренное скольжение в неотожженных образцах Ni. Отжиг при сравнительно низкой температуре, 373 К, не приводит к существенным изменениям зернограничной структуры. Так что неаккомодированное межзеренное скольжение по-прежнему эффективно в подавлении роста трещин после отжига при 373 К. Напротив, отжиг при 473 К приводит трансформации неравновесных границ зерен в равновесные, так как 473 К температура близкая к характеристической температуре T_{GBD} , при которой активируется зернограничная диффузия, приводящая к аннигиляции избыточных зернограничных дислокаций (в металлах T_{GBD} примерно равна $0.3 T_m$ [36]; для Ni $T_m = 1728$ К, т.е. $T_{GBD} \approx 520$ К). Таким образом, межзеренное скольжение и другие зернограничные упрочняющие механизмы оказываются подавленными и не способны эффективно препятствовать росту трещин в образцах, отожженных при 473 К.

4. Аккомодация пластического сдвига ротационной деформацией в нанокристаллических материалах

Межзеренное и классическое внутризеренное дислокационное скольжение являются типичными механизмами чистого пластического сдвига. Вместе с тем, в нанокристаллических материалах зачастую наблюдают [1, 2, 26, 33, 58–65] ротационные режимы деформации (связанные с локальными поворотами кристаллической решетки зерен). Например, экспериментальные данные [58–62], компьютерные модели [63, 64, 66, 67] и теоретические модели [65, 68] свидетельствуют о том, что миграция границ зерен представляет собой ротационный режим деформации,

эффективно действующий в наноматериалах. Однако, в экспериментах [1, 2, 5, 6] наблюдались повороты решетки в пластическом и сверхпластическом режимах, несвязанные с миграцией границ зерен.

Ротационный режим деформации часто протекает параллельно с чистым сдвигом (межзеренным или внутривзеренным). Именно так происходит в сверхпластических наноматериалах, где доминирующим механизмом является зернограничное скольжение, которое протекает одновременно с дислокационным скольжением и ротационной деформацией [1, 2]. Одновременное действие сдвиговых и ротационных механизмов в соседних зернах неизбежно приводит к несовместимости пластической деформации, если переход от одного режима в другой неоптимален. А она, в свою очередь, создает высокие внутренние напряжения, способные приводить к зарождению трещин. Соответственно, если мы хотим контролировать (с целью избежать) появление несовместимости деформации, представляется важным понимание микромеханизмов эффективного перехода между сдвиговой и ротационной деформацией. В работах [69, 70] подобный переход описывался в терминах мобильных дисклинаций как носителей ротационной деформации. Недавно был предложен механизм ротационной деформации в наноматериалах, описываемый эволюцией неподвижных дисклинаций [71]. В настоящем параграфе рассматривается теоретическая модель специального микромеханизма перехода от пластического сдвига к ротационной деформации, контролируемой неподвижными дисклинациями.

Рассмотрим геометрию специального механизма перехода от пластического сдвига (межзеренного или дислокационного скольжения) к ротационной деформации, осуществляющейся путем эволюции неподвижных дисклинаций. Для начала рассмотрим случай сверхпластической деформации наноматериалов с узким распределением размеров зерен (рис. 10а).

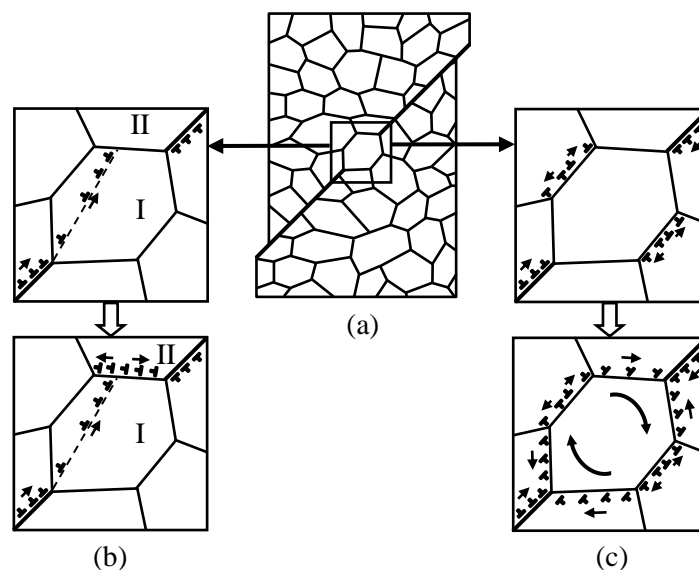


Рис. 10. Сдвиговый и ротационный режимы деформации в нанокристаллическом образце, содержащем мезоскопическую полосу сдвига. См. описание в тексте.

Согласно экспериментальным данным [72–74] пластическое течение в таких материалах осуществляется преимущественно путем зернограничного скольжения, локализованного в мезоскопических полосах сдвига. Каждая мезоскопическая полоса сдвига представляет собой цепочку границ зерен с приблизительно параллельными плоскостями, участвующими в коллективном процессе зернограничного скольжения, характеризующимся очень высокими уровнями локальной деформации (рис. 10а)

[72-74]. В общем случае, на начальной стадии мезоскопическая полоса скольжения состоит из нескольких фрагментов, разделенных зернами чья геометрия препятствует интенсивному зернограничному скольжению (рис. 10a). Дальнейшая эволюция подобной системы традиционно описывает через эмиссию решеточных дислокаций из тройных стыков (рис. 10b) [10, 57]. Решеточные дислокации достигают границы зерна, противоположной тройному стыку, и трансформируются в зернограничные дислокации (рис. 10b). Поля напряжений испущенных дислокаций блокируют последующую эмиссию из тройного стыка и, как следствие, зернограничное скольжение [40, 75]. Однако, если зернограничные дислокации способны переползти достаточно далеко от тройного стыка, последний может реактивироваться как источник решеточных дислокаций. Таким образом, через какое-то время система может достичь состояния динамического равновесия, в котором дислокационная эмиссия полностью компенсируется переползанием зернограничных дислокаций. Последний процесс, однако, достаточно медленный, поскольку контролируется зернограничной диффузией. Т.е. медленное переползание зернограничных дислокаций контролирует сравнительно быстрые процессы эмиссии и скольжения решеточных дислокаций [40, 75].

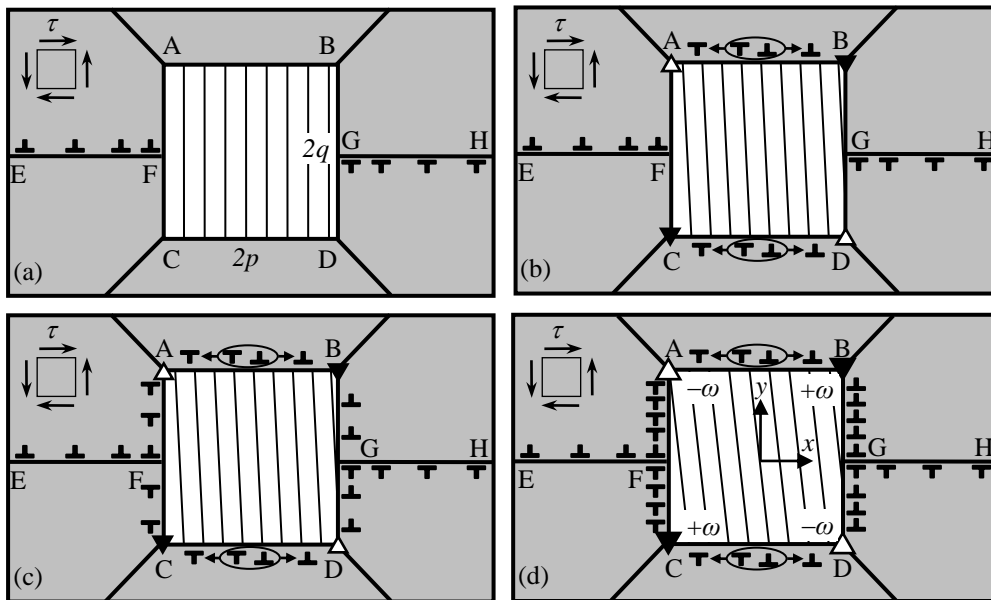


Рис. 11. Модель ротационной деформации, инициируемой зернограничным скольжением. См. описание в тексте.

Мы полагаем, что помимо этой стандартной схемы (рис. 10b), интенсивное зернограничное скольжение может трансформироваться в медленную ротационную деформацию, контролируемую все тем же диффузионным переползанием зернограничных дислокаций (рис. 10c). Для иллюстрации нашей идеи рассмотрим модельную структуру, представляемую прямоугольным зерном ABCD с геометрией, препятствующей зернограничному скольжению в мезоскопической полосе сдвига (рис. 11). В результате зернограничного скольжения в горизонтальных фрагментах EF и GH полосы сдвига формируются два скопления зернограничных дислокаций как показано на рис. 11. Совместное действие внешнего напряжения и напряжений, создаваемых дислокациями скоплений, инициируют специальную ротационную деформацию посредством механизма, рассмотренного в работе [71], с участием неподвижных дисклинаций. Более детально, зарождение и эволюция клиновых дисклинаций на гранях зерна ABCD осуществляется путем зернограничного скольжения на горизонтальных границах AB и CD и переползания зернограничных дислокаций на

вертикальных границах AC и BD. То есть зернограничное скольжение осуществляется посредством зернограничных дислокаций, зарождающихся на границах зерен AB и CD, и скользящих под действием приложенного напряжения вдоль этих границ (рис. 11b). Одновременно с этим идет переползание зернограничных дислокаций из тройных стыков A, B, C и D вдоль вертикальных границ AC и BD (рис. 11c,d). В результате на этих границах формируются две стенки зернограничных дислокаций противоположного знака. Формирование этих стенок вызывает пластическую деформацию зерна. также дислокационные стенки создают механические напряжения и увеличивают разориентацию вертикальных границ зерен AC и BD (рис. 11c,d), по сравнению с исходным состоянием (рис. 11a). Согласно теории дефектов [76] дислокационные стенки конечной длины AC и BD могут быть эквивалентно представлены квадруполем клиновых дисклинаций, расположенных на гранях зерна A, B, C и D (рис. 11c,d). Мощность дисклинаций постепенно нарастает с увеличением плотности зернограничных дислокаций на границах AC и BD.

Зернограничные дислокации скоплений в сегментах EF и GH мезоскопической полосы сдвига имеют вектора Бюргерса противоположные дислокациям, переползающим в границах AC и BD соответственно (рис. 11). Следовательно, дислокации, встречающиеся в стыках F и G, будут аннигилировать. Таким образом, можно ожидать, что через какое-то время система достигнет динамического равновесия, в котором генерация дислокаций на границах AB, CD и в полосах сдвига EF и GH полностью уравнивается аннигиляцией в тройных стыках F и G. При этом равновесное состояние характеризуется наличием неподвижных дисклинаций, характеризующихся некоторым значением равновесной мощности и создающими локальные повороты решетки. В следующем подразделе мы рассчитаем энергетические и силовые характеристики этого равновесного динамического состояния.

Рассмотрим энергетические характеристики процесса перехода от пластического сдвига к ротационной деформации. Для простоты исследуем двухмерную модельную систему, состоящую из прямоугольного зерна ABCD, разделяющего два сегмента EF и GH мезоскопической полосы сдвига (рис. 11). В сегментах EF и GH, перпендикулярных вертикальным границам зерен AC и BD соответственно, находятся два скопления зернограничных дислокаций как показано на рисунке 11. Каждое из скоплений предполагается состоящим из n идентичных краевых дислокаций, характеризующихся векторами Бюргерса \mathbf{b} (в сегменте EF) и $-\mathbf{b}$ (в сегменте GH). Головные дислокации скоплений предполагаются находящимися в центре вертикальных границ AC и BD (рис. 11). В соответствие с теоретическим анализом выше рассматриваемый процесс приводит к генерации квадруполь неподвижных клиновых дисклинаций A, B, C и D в условиях суперпозиции внешнего напряжения τ и напряжений, создаваемых дислокационными скоплениями. Дисклинационный квадруполь имеет размеры $2p \times 2q$ и мощность $\pm \omega$. Также нанокристаллический образец полагается упруго изотропным телом, характеризующимся модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν .

Изменение энергии ΔW в результате зарождения дисклинационного квадруполь в рамках обсуждаемой модели (рис. 11) было найдено в [16] в следующем виде:

$$\Delta W = 2D \left\{ \omega^2 q^2 \left[(1+t^2) \ln(1+t^2) - t^2 \ln t^2 \right] + \omega q b \sum_{i=1}^n \ln \frac{(x_i - qt)^2 + q^2}{(x_i + qt)^2 + q^2} - 2(\tau/D) \omega q^2 t \right\}. \quad (12)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, $t = p/q$, x_i – координаты дислокаций в скоплении, которые рассчитываются в соответствие с методом [77] как корни первой производной полиномов Лагерра. Выражение (12), даже записанное в нормализованных единицах ($\Delta W/(2Db^2)$, τ/D , x_i/b , q/b), тем не менее, формально не является универсальным

для всех материалов, т.к. координаты дислокаций x_i зависят от материальных констант. Однако расчеты показали, что эта зависимость пренебрежимо мала, поскольку наиболее существенный вклад во взаимодействие с дисклинационным квадруполем вносят только головные дислокации скопления, позиции которых зависят от материальных констант очень слабо. Таким образом, зависимость (12) является фактически универсальной.

Анализ (12) показывает, что энергия ΔW имеет минимум при некотором равновесном значении дисклинационной мощности ω_0 . Величина ω_0 может быть найдена из условия $(\partial \Delta W / \partial \omega)|_{\omega=\omega_0} = 0$ в следующем виде:

$$\omega_0 = \frac{2(\tau/D)qt - b \sum_{i=1}^n \ln \frac{(x_i - p)^2 + q^2}{(x_i + p)^2 + q^2}}{2q[(1+t^2)\ln(1+t^2) - t^2 \ln t^2]} \quad (13)$$

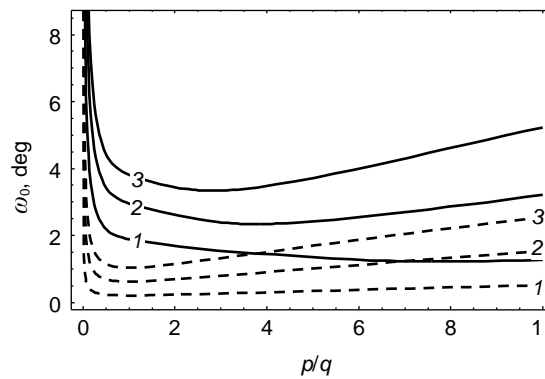


Рис. 12. Зависимости равновесной дисклинационной мощности ω_0 от параметра p/q , рассчитанные для $n=5$, $q=100b$ и разных значений внешнего напряжения τ . Сплошные кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям $\tau/D=0.01$, 0.03, 0.05, соответственно. Пунктирные кривые 1', 2' и 3' рассчитаны в случае отсутствия дислокационных скоплений для тех же значений напряжений, что и кривые 1, 2 и 3.

Зависимость величины ω_0 от параметра p/q показана на рис. 12 сплошными линиями для значений $n=5$, $q=100b$ и разных уровней внешнего напряжения. Для сравнения пунктирными линиями для аналогичных значений параметров задачи приведены зависимости равновесной мощности ω_0 , рассчитанной для случая отсутствия дислокационных скоплений (полагая $b=0$ в (13)) как это было сделано в работе [72]. Хорошо видно, что наличие дислокационных скоплений увеличивает равновесное значение ω_0 в несколько раз. Кроме того, хорошо видно, что пунктирные кривые имеют минимум при $p/q=1$ (это характерная особенность гомогенного зарождения дисклинационного квадруполя [72]). Наличие же дислокационных скоплений смещает минимум зависимости $\omega_0(p/q)$ в область больших значений параметра p/q . Для Ni с типичным уровнем напряжений течения $\tau=0.5$ ГПа с помощью формулы (13), полагая $n=5$, $q=100b$, получаем: $\omega_0 \approx 0.050 \approx 2.9^\circ$ для $p/q=1$, $\omega_0 \approx 0.13 \approx 7.6^\circ$ для $p/q=0.1$ и $\omega_0 \approx 0.053 \approx 3.1^\circ$ для $p/q=10$. Для случая $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и $\tau=1$ ГПа и тех же значений n и q , что и выше, получаем: $\omega_0 \approx 0.050 \approx 2.9^\circ$ для $p/q=1$, $\omega_0 \approx 0.13 \approx 7.5^\circ$ для $p/q=0.1$ и $\omega_0 \approx 0.054 \approx 3.1^\circ$ для $p/q=10$.

Таким образом, в данном параграфе рассмотрена теоретическая модель специального механизма перехода от пластического сдвига к ротационной деформации нанокристаллических материалах. Пластический сдвиг в таких материалах осуществляется путем зернограничного или дислокационного скольжения. Определенные структурные элементы могут служить препятствиями для пластического сдвига, что приводит к образованию скоплений зернограничных или решеточных дислокаций вблизи этих элементов. Например, скопления зернограничных дислокаций в мезоскопических полосах сдвига формируются вблизи зерен, разделяющих сегменты полос сдвига (рис. 10с и 11). Дислокационные скопления создают поля напряжений инициирующие ротационную деформацию в этих зернах. Ротационная деформация осуществляется посредством скольжения и переползания зернограничных дислокаций, что приводит к локальным поворотам кристаллических решеток зерен. Все эти процессы могут быть эффективно описаны через формирование неподвижных дисклинаций, расположенных в тройных стыках границ зерен и характеризующихся постепенно нарастающими мощностями (рис. 10с и 11). Через какое-то время система достигает состояния динамического равновесия, в котором упомянутые дисклинации, ответственные за локальные повороты кристаллической решетки, характеризуются равновесными значениями мощностей. Расчеты на примере Ni и α -Al₂O₃ показали, что специальный механизм перехода от пластического сдвига к ротационной деформации энергетически выгоден. Были найдены типичные значения равновесной дисклинационной мощности ω_0 , величина которой варьируется в диапазоне от 3° до 7.5° в нанокристаллическом Ni при напряжении $\tau = 0.5$ ГПа, и от 4° до 11° в нанокристаллическом α -Al₂O₃ при напряжении $\tau = 2$ ГПа.

Переход от пластического сдвига к ротационной деформации (рис. 10с и 11) представляет собой механизм аккомодации зернограничного скольжения, альтернативный стандартной эмиссии решеточных дислокаций из тройных стыков, трансформации их в зернограничные с последующим переползанием (рис. 10b). Скорость этого специального механизма перехода контролируется сравнительно медленным переползанием зернограничных дислокаций, скорость которого, в свою очередь, контролируется зернограничной диффузией.

Также следует отметить, что эта модель применима к стандартному механизму аккомодации зернограничного скольжения путем эмиссии решеточных дислокаций из тройных стыков (рис. 10b). Этот механизм создает скопления решеточных и зернограничных дислокаций, способных инициировать ротационную деформацию в соседних зернах (см., например, зерно II на рис. 11b), тем же способом, что и скопления зернограничных дислокаций в мезоскопических полосах сдвига (рис. 10с и 11).

5. Результаты и выводы

Таким образом, в настоящем обзоре, посвященной механизмам аккомодации зернограничного скольжения, рассмотрен ряд теоретических моделей. В п. 2 развита теоретическая модель механизма совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен, играющего роль специального режима пластической деформации нанокристаллических материалов. Его составляющие – зернограничное скольжение и миграция границ зерен – способны эффективно аккомодировать друг друга путем трансформации зернограничных дисклинаций. Теоретически показано (на примере нанокристаллического Ni), что пластичность и вязкость разрушения материала растет, если доминирует описываемый кооперативный механизм над чистым зернограничным скольжением или совместным зернограничным скольжением и миграцией (без расщепления). Результаты теоретического анализа (в частности, формирование нанозерен в районе тройных стыков) согласуются с

экспериментальными данными [21, 22] и компьютерными моделями [24, 25] о наблюдении деформационного зарождения нано- и микроскопических зерен на тройных стыках.

В п. 3 настоящей статьи предложены теоретические модели, описывающие упрочнение посредством неаккомодированного и аккомодированного межзеренного скольжения в наноматериалах при низких и средних температурах соответственно. В рамках первой модели неаккомодированное межзеренное скольжение вблизи вершин трещин при сравнительно низких температурах приводит к созданию неподвижных некристаллографических дислокаций Вольтерра в тройных стыках границ зерен (рис. 5). Для нанокристаллических Al, Ni и 3C-SiC, используя силовой критерий роста трещины, было вычислено, что эффективный коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* (фактически трещиностойкость) возрастает на величину $\sim 30\%$ благодаря дислокации, создаваемой неаккомодированным межзеренным скольжением тройном стыке, если расстояние r_0 между дислокацией и тройным стыком порядка 1 нм. Эффект значителен, однако увеличение K_{IC}^* стремительно падает с увеличением r_0 в 3C-SiC (рис. 6b). В нанокристаллических Al и Ni то же увеличение K_{IC}^* падает более плавно с ростом r_0 (рис. 6a). Чувствительность коэффициента интенсивности напряжений к расстоянию r_0 (рис. 6) коррелирует с чувствительностью к размеру зерна d , поскольку вероятность обнаружить тройной стык вблизи вершины трещины тем больше, чем меньше размер зерна.

В случае более высоких температур межзеренное скольжение эффективно аккомодируется диффузионным переползанием зернограницных дислокаций и эмиссией решеточных дислокаций в тело зерна. Аккомодированное межзеренное скольжение может приводить к значительному затуплению вершин трещин, что, в свою очередь, значительно (от 1.1 до 3 раз в зависимости от температуры) повышает трещиностойкость. Этот эффект наиболее ярко выражен в наноматериалах с очень малым размером зерен и существенно ослабевает с ростом размера зерна d (рис. 9).

В п. 4 описана теоретическая модель специального механизма перехода от пластического сдвига к ротационной деформации нанокристаллических материалах. Переход от пластического сдвига к ротационной деформации (рис. 10с и 11) представляет собой механизм аккомодации зернограницного скольжения, альтернативный стандартной эмиссии решеточных дислокаций из тройных стыков, трансформации их в зернограницные с последующим переползанием (рис. 10b). Механизм может быть эффективно описан через формирование неподвижных дисклинаций, расположенных в тройных стыках границ зерен и характеризующихся постепенно нарастающими мощностями (рис. 10с и 11). Расчеты на примере Ni и α -Al₂O₃ показали, что специальный механизм перехода от пластического сдвига к ротационной деформации энергетически выгоден. Были найдены типичные значения равновесной дисклинационной мощности ω_0 , величина которой варьируется в диапазоне от 3° до 7.5° в нанокристаллическом Ni при напряжении $\tau = 0.5$ ГПа, и от 4° до 11° в нанокристаллическом α -Al₂O₃ при напряжении $\tau = 2$ ГПа.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-29-00199).

Литература

- [1] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [2] A.K. Mukherjee // *Materials Science & Engineering A* **322** (2002) 1.

- [3] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *MRS Bulletin* **29** (2004) 22.
- [4] I.A. Ovid'ko // *Journal of Materials Science* **42** (2007) 1694.
- [5] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Acta Materialia* **53** (2005) 1.
- [6] C.C. Koch // *Journal of Materials Science* **42** (2007) 1403.
- [7] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, R.Z. Valiev // *Applied Physics Letters* **86** (2005) 103112.
- [8] X.L. Wu, Y.T. Zhu // *Physical Review Letters* **101** (2008) 025503.
- [9] Y.T. Zhu, X.L. Wu, X.Z. Liao, J. Narayan, S.N. Mathaudhu, L.J. Kecskes // *Applied Physics Letters* **95** (2009) 031909.
- [10] H. Van Swygenhoven, P.A. Derlet // *Physical Review B* **64** (2001) 224105.
- [11] J. Monk, B. Hyde, D. Farkas // *Journal of Materials Science* **41** (2006) 7741.
- [12] I. Szlufarska, A. Nakano, P. Vashista // *Science* **309** (2005) 911.
- [13] Y. Mo, I. Szlufarska // *Applied Physics Letters* **90** (2007) 181926.
- [14] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, Yu.V. Petrov, A.G. Sheinerman // *Reviews of Advanced Materials Science* **19** (2009) 63.
- [15] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Materialia* **57** (2009) 2217.
- [16] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Reviews of Advanced Materials Science* **19** (2009) 103.
- [17] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B* **84** (2011) 094103.
- [18] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Applied Physics Letters* **90** (2007) 171927.
- [19] M. Kleman, J. Friedel // *Reviews of Modern Physics* **80** (2008) 61.
- [20] C.C. Koch // *Reviews of Advanced Materials Science* **5** (2003) 91.
- [21] X. Wu, N. Tao, Y. Hong, G. Liu, B. Xu, J. Lu, K. Lu // *Acta Materialia* **53** (2005) 681.
- [22] H. Miura, T. Sakai, S. Andiarwanto, J.J. Jonas // *Philosophical Magazine* **85** (2005) 2653.
- [23] Y.S. Li, N.R. Tao, K. Lu // *Acta Materialia* **56** (2008) 230.
- [24] M.J. Demkowicz, A.S. Argon, D. Farkas, M. Frary // *Philosophical Magazine* **87** (2007) 4253.
- [25] A. Cao, Y. Wei // *Physical Review B* **76** (2007) 024113.
- [26] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **92** (2008) 081914.
- [27] Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Атомиздат, М., 1974).
- [28] C.J. Smithells, E.A. Brands, *Metals Reference Book* (Butterworth, London, 1976).
- [29] Y.M. Wang, E. Ma // *Acta Materialia* **52** (2004) 1699.
- [30] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **105** (2010) 055504.
- [31] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, A.G. Sheinerman, I.A. Ovid'ko // *International Journal of Plasticity* **26** (2010) 1629.
- [32] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, *Interfaces in crystalline materials* (Clarendon Press, Oxford, 1995).
- [33] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials* (Springer, Berlin, 2004).
- [34] A.S. Argon // *Acta Metallurgica* **27** (1979) 47.
- [35] V. Volterra // *Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure, 3^e série* **24** (1907) 401.
- [36] V.I. Vladimirov, *Einführung in die Physikalische Theorie der Plastizität und Festigkeit* (VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1976).
- [37] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang // *Acta Materialia* **51** (2003) 387.
- [38] H. Van Swygenhoven, P.A. Derlet, A. Hasnaoui // *Physical Review B* **66** (2002) 024101.
- [39] D. Farkas, S. Van Petegem, P.A. Derlet, H. Van Swygenhoven // *Acta Materialia* **53** (2005) 3115.

- [40] O.A. Ruano, J. Wadsworth, O.D. Sherby O.D // *Acta Materialia* **51** (2003) 3617.
- [41] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Scripta Materialia* **60** (2009) 36.
- [42] F.A. Mohamed, M. Chauhan // *Metallurgical and Materials Transactions A* **37** (2006) 3555.
- [43] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Physical Review B* **70** (2004) 184117.
- [44] S.P. Mehandru, A.B. Anderson // *Physical Review B* **42** (1990) 9040.
- [45] N. Du, A.F. Bower, P.E. Krajewski, E.M. Taleff // *Materials Science & Engineering A* **494** (2008) 86.
- [46] M.A.E. Khakani, M. Chaker, A. Jean, S. Boily, J.C. Kieffer, M.E. O'Hern, M.F. Ravet, F. Rousseaux // *Journal of Materials Research* **9** (1994) 96.
- [47] S. Veprek, S. Mukherjee, P. Karvankova, H.-D. Mannling, J.L. He, K. Moto, J. Prochazka, A.S. Argon // *Journal of Vacuum Science & Technology A* **21** (2003) 532.
- [48] В.В. Панасюк (ред.), *Механика разрушения и прочность материалов: Справ. пособие: В 4 т. — Т. 2* (Наукова Думка, Киев, 1988).
- [49] G.E. Beltz, D.M. Lipkin, L.L. Fischer // *Physical Review Letters* **82** (1999) 4468.
- [50] M. Huang, Z. Li // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **52** (2004) 1991.
- [51] M. Creager, P.C. Paris // *International Journal of Fracture* **3** (1967) 247.
- [52] J. Kwieciski, J.W. Wyrzykowski // *Acta Metallurgica et Materialia* **39** (1991) 1953.
- [53] A.A. Kaminskii, M.Sh. Akchurin, R.V. Gainutdinov, K. Takaichi, A. Shirakava, H. Yagi, T. Yanagitani, K. Ueda // *Crystallography Reports* **50** (2005) 869.
- [54] Y.T. Pei, D. Galvan, J.T.M. De Hosson // *Acta Materialia* **53** (2005) 4505.
- [55] R. Mirshams, S.H. Whang, C.H. Xiao, W.M. Yin // *Materials Science & Engineering A* **315** (2001) 21.
- [56] J.Y. Huang, Y.T. Zhu, H. Jiang, T.C. Lowe // *Acta Materialia* **49** (2001) 1497.
- [57] R.Z. Valiev // *Nature Materials* **3** (2004) 511.
- [58] M. Jin, A.M. Minor, E.A. Stach, J.W. Morris Jr. // *Acta Materialia* **52** (2004) 5381.
- [59] W.A. Soer, J.Th.M. De Hosson, A.M. Minor, J.W. Morris Jr., E.A. Stach // *Acta Materialia* **52** (2004) 5783.
- [60] J.T.M. De Hosson, W.A. Soer, A.M. Minor, Z. Shan, E.A. Stach, S.A. Syed Asif, O.L. Warren // *Journal of Materials Science* **41** (2006) 7704.
- [61] K. Zhang, J.R. Weertman, J.A. Eastman // *Applied Physics Letters* **85** (2004) 5197.
- [62] P.L. Gai, K. Zhang, J.R. Weertman // *Scripta Materialia* **56** (2007) 25.
- [63] D. Farkas, A. Frøseth, H. Van Swygenhoven // *Scripta Materialia* **55** (2006) 695.
- [64] J. Monk, D. Farkas // *Physical Review B* **75** (2007) 045414.
- [65] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, I.A. Ovid'ko // *Scripta Materialia* **58** (2008) 850.
- [66] T. Shimokawa, A. Nakatani, H. Kitagawa // *Physical Review B* **71** (2005) 224110.
- [67] F. Sansoz, V. Dupont // *Applied Physics Letters* **89** (2006) 111901.
- [68] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Materialia* **56** (2008) 2718.
- [69] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Acta Materialia* **51** (2003) 4059.
- [70] А.Л. Колесникова, И.А. Овидько, А.Е. Романов // *Письма в ЖТФ* **33** (2007) 26.
- [71] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Scripta Materialia* **59** (2008) 119.
- [72] J. Markmann, P. Bunzel, H. Rösner, K.W. Liu, K.A. Padmanabhan, R. Birringer, H. Gleiter, J. Weissmüller // *Scripta Materialia* **49** (2003) 637.
- [73] A.V. Sergueeva, A.K. Mukherjee // *Reviews of Advanced Materials Science* **13** (2006) 1.
- [74] A.V. Sergueeva, N.A. Mara, N.A. Krasilnikov, R.Z. Valiev, A.K. Mukherjee // *Philosophical Magazine* **86** (2006) 5797.
- [75] T.G. Langdon // *Journal of Materials Science* **41** (2006) 597.
- [76] В.И. Владимиров, А.Е. Романов, *Дисклинации в кристаллах* (Наука, Л., 1986).
- [77] J.D. Eshelby, F.C. Frank, F.R.N. Nabarro // *Philosophical Magazine* **42** (1951) 351.

ACCOMMODATION OF GRAIN BOUNDARY SLIDING AND FRACTURE TOUGHNESS ENHANCEMENT IN DEFORMED NANOCRYSTALLINE MATERIALS

S.V. Bobylev^{1,2,3*}, I.A. Ovid'ko^{1,2,3}

¹Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, 195251, Russia

²St. Petersburg State University, St. Petersburg, 198504, Russia

³Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, 199178, Russia

*e-mail: bobylev.s@gmail.com

Abstract. This review presents theoretical models of grain-boundary sliding accommodation mechanisms in deformed nanomaterials. Described mechanisms serve as the special modes of plastic deformation and also can enhance fracture toughness. Accommodation mechanism via stress-driven splitting and migration of grain boundaries is reviewed. The model describing the effect of accommodated and non-accommodated grain-boundary sliding on fracture toughness of nanomaterials is considered. Also, theoretical model of special accommodating mechanism representing crossover from plastic shear into rotational deformation is proposed.

Acknowledgements. This work was supported by the Russian Science Foundation (grant 14-29-00199).

References

- [1] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [2] A.K. Mukherjee // *Materials Science & Engineering A* **322** (2002) 1.
- [3] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *MRS Bulletin* **29** (2004) 22.
- [4] I.A. Ovid'ko // *Journal of Materials Science* **42** (2007) 1694.
- [5] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Acta Materialia* **53** (2005) 1.
- [6] C.C. Koch // *Journal of Materials Science* **42** (2007) 1403.
- [7] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, R.Z. Valiev // *Applied Physics Letters* **86** (2005) 103112.
- [8] X.L. Wu, Y.T. Zhu // *Physical Review Letters* **101** (2008) 025503.
- [9] Y.T. Zhu, X.L. Wu, X.Z. Liao, J. Narayan, S.N. Mathaudhu, L.J. Kecskes // *Applied Physics Letters* **95** (2009) 031909.
- [10] H. Van Swygenhoven, P.A. Derlet // *Physical Review B* **64** (2001) 224105.
- [11] J. Monk, B. Hyde, D. Farkas // *Journal of Materials Science* **41** (2006) 7741.
- [12] I. Szlufarska, A. Nakano, P. Vashista // *Science* **309** (2005) 911.
- [13] Y. Mo, I. Szlufarska // *Applied Physics Letters* **90** (2007) 181926.
- [14] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, Yu.V. Petrov, A.G. Sheinerman // *Reviews of Advanced Materials Science* **19** (2009) 63.
- [15] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Materialia* **57** (2009) 2217.
- [16] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Reviews of Advanced Materials Science* **19** (2009) 103.
- [17] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B* **84** (2011) 094103.
- [18] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Applied Physics Letters* **90** (2007) 171927.

- [19] M. Kleman, J. Friedel // *Reviews of Modern Physics* **80** (2008) 61.
- [20] C.C. Koch // *Reviews of Advanced Materials Science* **5** (2003) 91.
- [21] X. Wu, N. Tao, Y. Hong, G. Liu, B. Xu, J. Lu, K. Lu // *Acta Materialia* **53** (2005) 681.
- [22] H. Miura, T. Sakai, S. Andiarwanto, J.J. Jonas // *Philosophical Magazine* **85** (2005) 2653.
- [23] Y.S. Li, N.R. Tao, K. Lu // *Acta Materialia* **56** (2008) 230.
- [24] M.J. Demkowicz, A.S. Argon, D. Farkas, M. Frary // *Philosophical Magazine* **87** (2007) 4253.
- [25] A. Cao, Y. Wei // *Physical Review B* **76** (2007) 024113.
- [26] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **92** (2008) 081914.
- [27] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [28] C.J. Smithells, E.A. Brands, *Metals Reference Book* (Butterworth, London, 1976).
- [29] Y.M. Wang, E. Ma // *Acta Materialia* **52** (2004) 1699.
- [30] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **105** (2010) 055504.
- [31] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, A.G. Sheinerman, I.A. Ovid'ko // *International Journal of Plasticity* **26** (2010) 1629.
- [32] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, *Interfaces in crystalline materials* (Clarendon Press, Oxford, 1995).
- [33] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials* (Springer, Berlin, 2004).
- [34] A.S. Argon // *Acta Metallurgica* **27** (1979) 47.
- [35] V. Volterra // *Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure, 3^e série* **24** (1907) 401.
- [36] V.I. Vladimirov, *Einführung in die Physikalische Theorie der Plastizität und Festigkeit* (VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1976).
- [37] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang // *Acta Materialia* **51** (2003) 387.
- [38] H. Van Swygenhoven, P.A. Derlet, A. Hasnaoui // *Physical Review B* **66** (2002) 024101.
- [39] D. Farkas, S. Van Petegem, P.A. Derlet, H. Van Swygenhoven // *Acta Materialia* **53** (2005) 3115.
- [40] O.A. Ruano, J. Wadsworth, O.D. Sherby O.D // *Acta Materialia* **51** (2003) 3617.
- [41] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Scripta Materialia* **60** (2009) 36.
- [42] F.A. Mohamed, M. Chauhan // *Metallurgical and Materials Transactions A* **37** (2006) 3555.
- [43] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Physical Review B* **70** (2004) 184117.
- [44] S.P. Mehandru, A.B. Anderson // *Physical Review B* **42** (1990) 9040.
- [45] N. Du, A.F. Bower, P.E. Krajewski, E.M. Taleff // *Materials Science & Engineering A* **494** (2008) 86.
- [46] M.A.E. Khakani, M. Chaker, A. Jean, S. Boily, J.C. Kieffer, M.E. O'Hern, M.F. Ravet, F. Rousseaux // *Journal of Materials Research* **9** (1994) 96.
- [47] S. Veprek, S. Mukherjee, P. Karvankova, H.-D. Mannling, J.L. He, K. Moto, J. Prochazka, A.S. Argon // *Journal of Vacuum Science & Technology A* **21** (2003) 532.
- [48] V.V. Panasyuk (ed.), *Fracture Mechanics and Strength of Materials, vol. 2* (Naukova Dumka, Kiev, 1988). (In Russian).
- [49] G.E. Beltz, D.M. Lipkin, L.L. Fischer // *Physical Review Letters* **82** (1999) 4468.
- [50] M. Huang, Z. Li // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **52** (2004) 1991.
- [51] M. Creager, P.C. Paris // *International Journal of Fracture* **3** (1967) 247.
- [52] J. Kwieciski, J.W. Wyrzykowski // *Acta Metallurgica et Materialia* **39** (1991) 1953.
- [53] A.A. Kaminskii, M.Sh. Akchurin, R.V. Gainutdinov, K. Takaichi, A. Shirakava, H. Yagi, T. Yanagitani, K. Ueda // *Crystallography Reports* **50** (2005) 869.

- [54] Y.T. Pei, D. Galvan, J.T.M. De Hosson // *Acta Materialia* **53** (2005) 4505.
- [55] R. Mirshams, S.H. Whang, C.H. Xiao, W.M. Yin // *Materials Science & Engineering A* **315** (2001) 21.
- [56] J.Y. Huang, Y.T. Zhu, H. Jiang, T.C. Lowe // *Acta Materialia* **49** (2001) 1497.
- [57] R.Z. Valiev // *Nature Materials* **3** (2004) 511.
- [58] M. Jin, A.M. Minor, E.A. Stach, J.W. Morris Jr. // *Acta Materialia* **52** (2004) 5381.
- [59] W.A. Soer, J.Th.M. De Hosson, A.M. Minor, J.W. Morris Jr., E.A. Stach // *Acta Materialia* **52** (2004) 5783.
- [60] J.T.M. De Hosson, W.A. Soer, A.M. Minor, Z. Shan, E.A. Stach, S.A. Syed Asif, O.L. Warren // *Journal of Materials Science* **41** (2006) 7704.
- [61] K. Zhang, J.R. Weertman, J.A. Eastman // *Applied Physics Letters* **85** (2004) 5197.
- [62] P.L. Gai, K. Zhang, J.R. Weertman // *Scripta Materialia* **56** (2007) 25.
- [63] D. Farkas, A. Frøseth, H. Van Swygenhoven // *Scripta Materialia* **55** (2006) 695.
- [64] J. Monk, D. Farkas // *Physical Review B* **75** (2007) 045414.
- [65] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, I.A. Ovid'ko // *Scripta Materialia* **58** (2008) 850.
- [66] T. Shimokawa, A. Nakatani, H. Kitagawa // *Physical Review B* **71** (2005) 224110.
- [67] F. Sansoz, V. Dupont // *Applied Physics Letters* **89** (2006) 111901.
- [68] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Materialia* **56** (2008) 2718.
- [69] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Acta Materialia* **51** (2003) 4059.
- [70] A.L. Kolesnikova, I.A. Ovid'ko, A.E. Romanov // *Technical Physics Letters* **33** (2007) 641.
- [71] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Scripta Materialia* **59** (2008) 119.
- [72] J. Markmann, P. Bunzel, H. Rösner, K.W. Liu, K.A. Padmanabhan, R. Birringer, H. Gleiter, J. Weissmüller // *Scripta Materialia* **49** (2003) 637.
- [73] A.V. Sergueeva, A.K. Mukherjee // *Reviews of Advanced Materials Science* **13** (2006) 1.
- [74] A.V. Sergueeva, N.A. Mara, N.A. Krasilnikov, R.Z. Valiev, A.K. Mukherjee // *Philosophical Magazine* **86** (2006) 5797.
- [75] T.G. Langdon // *Journal of Materials Science* **41** (2006) 597.
- [76] V.I. Vladimirov, A.E. Romanov, *Disclinations in Crystals* (Nauka, Leningrad, 1986). (In Russian).
- [77] J.D. Eshelby, F.C. Frank, F.R.N. Nabarro // *Philosophical Magazine* **42** (1951) 351.