

# СТИМУЛИРУЕМАЯ НАПРЯЖЕНИЕМ МИГРАЦИЯ МАЛОУГЛОВЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В НАНОКОМПОЗИТАХ С НЕКОГЕРЕНТНЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

Я.В. Конаков<sup>1,2</sup>, И.А. Овидько<sup>1,2,3\*</sup>, А.Г. Шейнерман<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Научно-исследовательская лаборатория “Механика новых наноматериалов”,

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

<sup>2</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178

<sup>3</sup>Математико-механический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 198504

\*e-mail: ovidko@nano.ipme.ru

**Аннотация.** Рассмотрена миграция малоугловых границ наклона в нанокристаллических и ультрамелкозернистых композитах, состоящих из металлической матрицы и наноразмерных некогерентных (керамических или металлических) включений. В рамках модели границы зерен рассматриваются как стенки краевых решеточных дислокаций, которые скользят в металлической матрице, но не могут проникнуть внутрь нановключений. В результате моделирования методом двумерной дислокационной динамики выявлено два основных режима миграции малоугловых границ. В первом режиме мигрирующие границы полностью тормозятся включениями, и их миграция прекращается. Во втором режиме некоторые сегменты движущихся границ тормозятся включениями, а оставшиеся сегменты продолжают мигрировать на большие расстояния. Переход от первого ко второму режиму возможен при достижении сдвиговым напряжением критического значения  $\tau_c$ . При этом критическое напряжение увеличивается с ростом объемной доли включений, а увеличение расстояния от исходного положения мигрирующей границы до ближайших включений может как уменьшать, так и увеличивать критическое напряжение.

## 1. Введение

Известно, что уникальные механические свойства нанокристаллических (НК) и ультрамелкозернистых (УМЗ) металлических материалов во многом определяются механизмами деформации таких материалов. В частности, наряду со скольжением решеточных дислокаций и двойникованием пластическая деформация в таких материалах может осуществляться в результате миграции границ зерен (ГЗ) под действием приложенного напряжения [1–20]. При этом, как и в случае термоактивированной миграции ГЗ, их атермическая миграция под действием внешней нагрузки может приводить к нежелательному росту зерен.

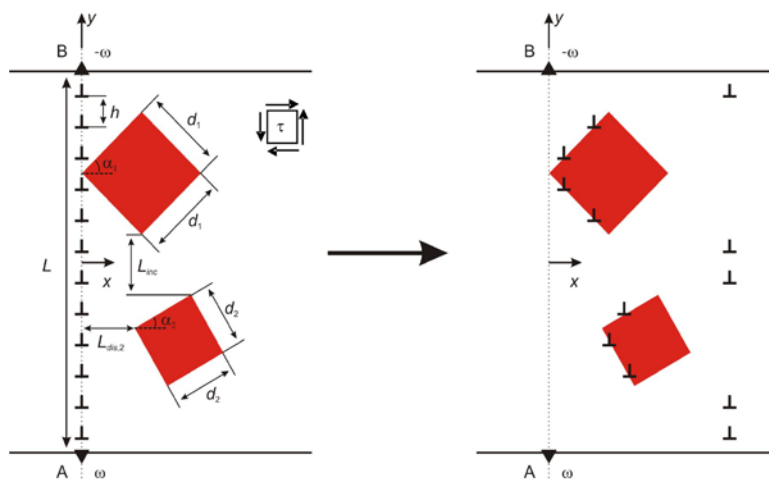
В последние годы значительное количество исследований было посвящено изучению миграции ГЗ под действием внешней нагрузки в однородных НК и УМЗ материалах [1–20]. В то же время исследованию миграции ГЗ под действием внешней нагрузки в НК и УМЗ материалах, содержащих включения второй фазы, посвящены



Исследуем случай, при котором механическая нагрузка, приложенная к нанокompозиту, приводит к миграции ГЗ в его матрице. Будем моделировать мигрирующие ГЗ как малоугловые границы наклона. Из-за различия типов кристаллической решетки матрицы и нановключений мигрирующие ГЗ не могут проникнуть в нановключения и изгибаются вокруг них (рис. 1с).

Для простоты рассмотрим двумерную модель нанокompозитного материала, в рамках которой будем моделировать симметричную малоугловую границу наклона АВ до начала миграции как стенку краевых решеточных дислокаций с равными векторами Бюргерса  $\mathbf{b}$ . Малоугловая граница наклона характеризуется разориентацией  $\theta$ , определяемой соотношением Франка:  $\sin(\theta/2) = b/(2h)$ , где  $h$  – период, а  $b$  – величина вектора Бюргерса. Следуя [26, 27], будем полагать, что тройные стыки А и В являются скомпенсированными и содержат клиновые дисклинации мощностью  $\omega$  и  $-\omega$  ( $\omega = \theta$ ), (рис. 2а), поля напряжений которых компенсируют дальнедействующее поле напряжений, создаваемое стенкой краевых дислокаций.

Рассмотрим теперь миграцию малоугловой границы наклона АВ под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$ . Будем полагать, что в рассматриваемой двумерной модели нановключения имеют квадратную форму, а их количество перед фронтом мигрирующей границы АВ равно  $P$ . Обозначим длины сторон квадратных нановключений как  $d_m$ , а углы между одной из сторон нановключений и нормалью к плоскости ГЗ как  $\alpha_m$ , где  $m = 1, \dots, P$  (рис. 2).

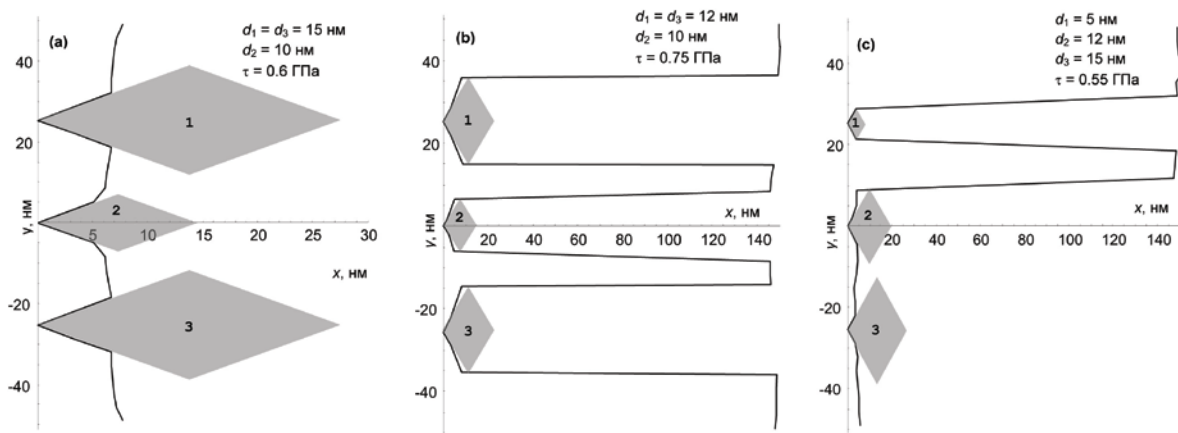


**Рис. 2.** Миграция малоугловой границы наклона АВ возле некогерентных нановключений.

Рассмотрим процесс стимулированной напряжением миграции малоугловой ГЗ АВ в нанокompозите, содержащем некогерентные нановключения. Для определенности рассмотрим случай низких гомологических температур. В этом случае можно пренебречь эффектами, связанными с термической миграцией ГЗ, в том числе с диффузионной аккомодацией напряжений, создаваемых дисклинациями в тройных стыках. Кроме того, в этом случае из-за низкой скорости диффузии включения будут неподвижны и не смогут мигрировать вместе с ГЗ. Для анализа миграции ГЗ будем использовать методы двумерной дислокационной динамики, используемые ранее для описания формирования, распада или эволюции ГЗ (например, [28–31]). В рамках этого подхода каждая дислокация в ГЗ АВ находится под действием сил, создаваемых сдвиговым напряжением, другими дислокациями, принадлежащими ГЗ, а также дисклинационным диполем. Будем предполагать, что каждая дислокация движется только вдоль своей плоскости скольжения (вдоль оси  $x$  в системе координат,

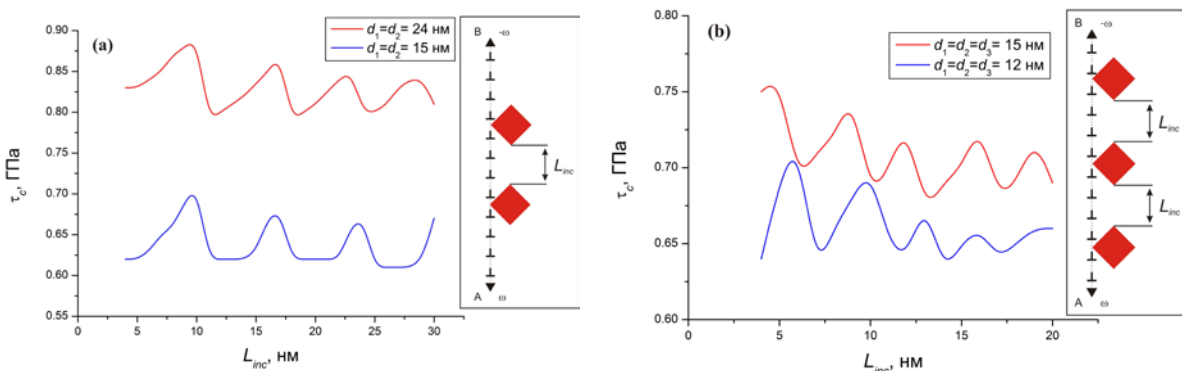


демонстрирует промежуточный случай, когда часть сегментов ГЗ останавливается не только на границах включений, но и между ними, а сегмент ГЗ между включениями 2 и 3 отрывается от оставшейся части ГЗ и мигрирует неограниченно.



**Рис. 3.** Геометрия мигрирующей границы зерен. (а) Равновесный профиль мигрирующей границы зерен, соответствующий режиму ограниченной миграции. (б,с) Неравновесные профили мигрирующей границы зерен, соответствующие режиму неограниченной миграции.

Обозначим критическое напряжение, при котором происходит переход от ограниченного режима миграции ГЗ к неограниченному режиму, как  $\tau_c$ . Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от различных параметров системы приведены на рис. 4–7. В частности, рис. 4 иллюстрирует зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от разности координат  $L_{inc}$  вдоль оси  $y$  ближайших друг к другу углов соседних включений (расположенных как показано на рис. 4) для случая двух и трех включений.

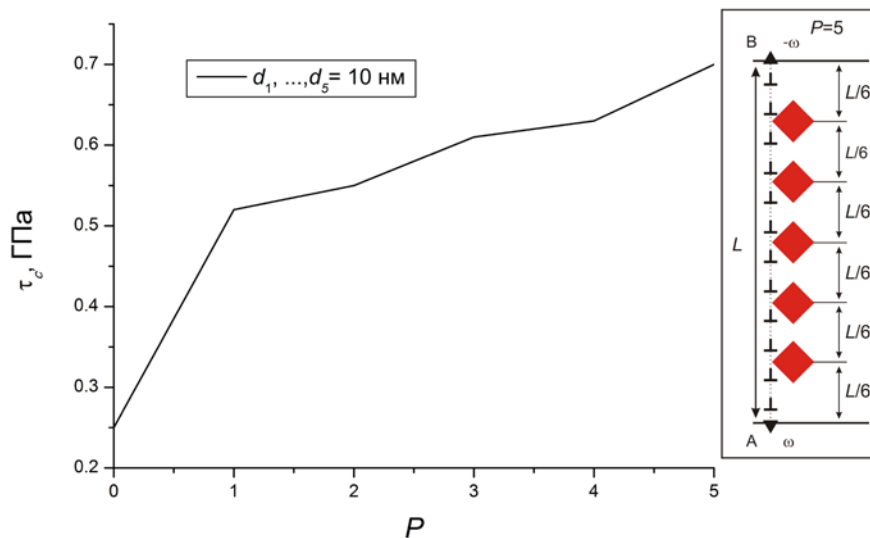


**Рис. 4.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от параметра  $L_{inc}$ , характеризующего расстояние между включениями, для случая, когда включения в исходном состоянии расположены вдоль границы зерен.

На рис. 4 видно, что по мере увеличения расстояния  $L_{inc}$  между включениями критическое напряжение  $\tau_c$ , необходимое для начала неограниченной миграции сегментов ГЗ между ними, постепенно снижается. По-видимому, подобная тенденция связана с возрастанием среднего расстояния между дислокациями, принадлежащими движущемуся и неподвижному сегментам ГЗ и, как следствие, уменьшением силы притяжения мигрирующего сегмента ГЗ к ее неподвижному сегменту на начальном этапе миграции.



На рисунке 7 изображена зависимость критического напряжения, необходимого для неограниченной миграции всех «нефиксированных» нановключениями участков ГЗ, от количества  $P$  включений возле ГЗ фиксированной длины. При построении графика на рис. 7 предполагалось, что нановключения до начала миграции ГЗ примыкают к границе и равномерно распределены вдоль нее. Рисунок 7 демонстрирует, что критическое напряжение  $\tau_c$  растет с увеличением  $P$ . Исходя из этого, можно заключить, что увеличение объемной доли включений приводит к росту критического напряжения, необходимого для значительной миграции границ зерен.



**Рис. 7.** Зависимость критического напряжения  $\tau_c$  от количества нановключений  $P$ , равномерно распределенных вдоль границы зерен.

#### 4. Заключение

Таким образом, мы рассмотрели стимулируемую напряжением миграцию малоугловых ГЗ в металломатричных нанокompозитах с некогерентными (керамическими или металлическими) включениями. Результаты моделирования методом двумерной дислокационной динамики показали, что в нанокompозитах возможна ограниченная и неограниченная миграция ГЗ. При ограниченной миграции мигрирующие ГЗ в конечном счете достигают положений равновесия. При неограниченной миграции часть сегментов мигрирующей ГЗ останавливается на границе нановключений или вблизи них, в то время как другие движутся неограниченно далеко от включений. (В реальных материалах границы зерен, мигрирующие в неограниченном режиме, останавливаются у соседних границ зерен.) Переход от ограниченного к неограниченному режиму миграции происходит при некотором критическом значении сдвигового напряжения. Анализ показывает, что критическое напряжение увеличивается с ростом объемной доли включений, а увеличение расстояния от исходного положения мигрирующей границы до ближайших включений может как уменьшать, так и увеличивать критическое напряжение.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 14-29-00199).*

#### Литература

- [1] M. Jin, A.M. Minor, E.A. Stach, J.W. Morris Jr. // *Acta Materialia* **52** (2004) 5381.
- [2] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **87** (2005) 251916.





# STRESS-DRIVEN MIGRATION OF LOW-ANGLE GRAIN BOUNDARIES IN NANOCOMPOSITES WITH INCOHERENT INCLUSIONS

Ya.V. Konakov<sup>1,2</sup>, I.A. Ovid'ko<sup>1,2,3\*</sup>, A.G. Sheinerman<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Research Laboratory for Mechanics of New Nanomaterials,

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

<sup>2</sup>Institute for Problems in Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg 199178, Russia

<sup>3</sup>Department of Mathematics and Mechanics, Saint Petersburg State University, St. Petersburg 198504, Russia

\*e-mail: ovidko@nano.ipme.ru

**Abstract.** We consider migration of low-angle tilt boundaries in nanocrystalline and ultrafine-grained composites each consisting of a metallic matrix and nanoscale incoherent inclusions. Within the model, grain boundaries are considered as the walls of edge dislocations that slip in the metallic matrix but cannot penetrate nanoinclusions. Using the two-dimensional dislocation dynamics simulations, we revealed two principle modes of migration of low-angle grain boundaries. In the first mode, migrating grain boundaries are retarded by nanoinclusions, and grain boundary migration stops. In the second regime, some segments of the migrating grain boundaries are retarded by inclusions while others proceed to migrate by large distances. The transition from the first mode to the second one occurs when the resolved shear stress reaches some critical stress  $\tau_c$ . The critical stress increases with increasing the volume fraction of inclusions, while an increase in the distance between the initial position of the migrating grain boundary and the nearest nanoinclusions can either reduce or increase the critical stress.

## **Acknowledgement**

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

## **References**

- [1] M. Jin, A.M. Minor, E.A. Stach, J.W. Morris Jr. // *Acta Materialia* **52** (2004) 5381.
- [2] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **87** (2005) 251916.
- [3] D.S. Gianola, S. Van Petegem, M. Legros, S. Brandstetter, H. Van Swygenhoven, K.J. Hemker // *Acta Materialia* **54** (2006) 2253.
- [4] F. Sansoz, V. Dupont // *Applied Physics Letters* **89** (2006) 111901.
- [5] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Materialia* **55** (2007) 4041.
- [6] P.L. Gai, K. Zhang, J. Weertman // *Scripta Materialia* **56** (2007) 25.
- [7] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [8] J. Monk, D. Farkas // *Physical Review B* **75** (2007) 045414.
- [9] V. Dupont, F. Sansoz // *Acta Materialia* **56** (2008) 6013.
- [10] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Materialia* **56** (2008) 2718.
- [11] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Materialia* **59** (2011) 5023.
- [12] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, I.A. Ovid'ko // *Scripta Materialia* **58** (2008) 850.

- [13] T.J. Rupert, D.S., Gianola, Y. Gan, K.J. Hemker // *Science* **326** (2009) 1686.
- [14] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **105** (2010) 055504.
- [15] S. Cheng, Y. Zhao, Y. Wang, Y. Li, X.-L. Wang, P.K. Liaw, E.J. Lavernia // *Physical Review Letters* **104** (2010) 255501.
- [16] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B* **84** (2011) 094103.
- [17] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **109** (2012) 175501.
- [18] V. Péron-Lühns, A. Jérusalem, F. Sansoz, L. Stainier, L. Noels // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **61** (2013) 1895.
- [19] V. Péron-Lühns, F. Sansoz, L. Noels // *Acta Materialia* **64** (2014) 419.
- [20] V. Taupin, L. Capolungo, C. Fressengeas // *International Journal of Plasticity* **53** (2014) 179.
- [21] Y. Lin, H. Wen, Y. Li, B. Wen, E.J. Lavernia // *Metallurgical and Materials Transactions B* **45** (2014) 795.
- [22] Y. Lin, B. Xu, Y. Feng, E.J. Lavernia // *Journal of Alloys and Compounds* **596** (2014) 79.
- [23] K. Dám, P. Lejček // *Materials Characterization* **76** (2013) 69.
- [24] Y. Lin, H. Wen, Y. Li, B. Wen, L. Wei, E.J. Lavernia // *Acta Materialia* **82** (2015) 304.
- [25] T. Zálezák, A. Dlouhý // *Acta Physica Polonica A* **122** (2012) 450.
- [26] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Reviews on Advanced Materials Science* **39** (2014) 99.
- [27] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Journal of Materials Science* **50** (2015) 4430.
- [28] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Journal of Physics D* **37** (2004) 269.
- [29] S.V. Bobylev SV, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **52** (2004) 3793.
- [30] E.A. Rzhavtsev, M.Yu. Gutkin // *Scripta Materialia* **100** (2015) 102.
- [31] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **88** (2015) 260.
- [32] U.F. Kocks, A.S. Argon, M.F. Ashby // *Progress in Materials Science* **19** (1975) 1.