

ВЛИЯНИЕ НАНОДВОЙНИКОВ НА СТИМУЛИРУЕМУЮ НАПРЯЖЕНИЕМ МИГРАЦИЮ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ДЕФОРМИРУЕМЫХ НАНОМАТЕРИАЛАХ

И.А. Овидько^{1,2,3*}, Н.В. Скиба^{1,2,3}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет, Санкт-Петербург, 195215, Россия

²Математико-механический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, 198504, Россия

³Институт проблем машиноведения Российской академии наук, Санкт-Петербург 199178, Россия

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

Аннотация. Предложена теоретическая модель миграции границ зерен под действием внешней механической нагрузки в наноматериалах, содержащих ансамбли нанодвойников. В рамках модели используется дисклинационное описание стимулируемой напряжением миграции границ зерен в зерне, исходно содержащем нанодвойники. Рассчитаны энергетические характеристики и критические напряжения реализации процесса такой миграции. Проведено сравнение напряжений, требуемых для миграции границы зерен в зернах с нанодвойниками границами и без них на примерах нанокристаллической и ультрамелкозернистой меди (Cu).

1. Введение

Нанокристаллические и ультрамелкозернистые материалы (далее - наноматериалы) характеризуются большой объемной долей границ зерен, которые активируют специфические механизмы пластической деформации. Например, границы зерен в нанокристаллических материалах обеспечивают действие таких специфических механизмов деформации, как деформация двойникованием [1-4], зернограничное скольжение [5, 6], диффузия по границам зерен и их тройным стыкам [7, 8] и ротационная деформация [9, 10]. В настоящее время существуют экспериментальные исследования [11-13] и результаты компьютерного моделирования [14, 15], которые указывают, что пластическая деформация в наноматериалах может эффективно реализовываться за счет стимулируемой напряжением миграции границ зерен. Также, границы зерен в наноматериалах являются источниками частичных дислокаций, скольжение которых в теле зерна приводит к формированию деформационных двойников, примыкающих к границам зерен [1-4]. Существующие теоретические модели [16-18], описывают миграцию границ зерен под действием внешней механической нагрузки в наноматериалах без учета наличия нанодвойниковых прослоек в зернах. Однако, стимулируемая напряжением миграция границ зерен, к которым примыкают нанодвойники, способна уменьшать протяженность этих двойниковых прослоек. Предполагается, что процесс совместной миграции границы зерна и двойниковых границ нанодвойников облегчает миграцию границ зерен по сравнению с одиночной миграцией границ зерен. Таким образом, целью настоящей работы является разработка теоретической модели, описывающей миграцию границы

[19] известно, что такие прямолинейные дефекты определяются, как частичные клиновые дисклинации с мощностью $\pm\Omega$ ($\pm\Omega$ -дисклинации) (Рис. 1b). Следует отметить, что мощность Ω этих дисклинаций равна параметру разориентации границы зерна AB . Таким образом, миграция границы зерна AB приводит к появлению квадруполя $ABB'A'$ частичных клиновых дисклинаций с мощностью $\pm\Omega$ (Рис. 1b).

В рамках модели, миграция границы зерна AB сопровождается миграцией двойниковых границ CD и EF , которые примыкают к границе зерна AB и моделируются диполями $\pm\omega$ -дисклинаций (Рис. 1b). Миграция двойниковых границ CD и EF приводит к уменьшению длины нанодвойниковых прослоек $CDD'C'$ и $EFF'E'$ на величину p , равную расстоянию миграции границы зерна AB (Рис. 1b). Уменьшение протяженности нанодвойников $CDD'C'$ и $EFF'E'$ способствует снижению упругой энергии дефектной системы и, следовательно, облегчает процесс миграции границы зерна AB . Другими словами, совместная миграция границы зерна AB и двойниковых границ CD и EF становится возможной при более низких значениях внешнего сдвигового напряжения τ по сравнению с напряжениями, требуемыми для одиночной миграции границы зерна AB .

Рассмотрим энергетические характеристики и оценим критические напряжения миграции границ зерен под действием внешнего напряжения в нанокристаллических материалах с деформационными нанодвойниками.

3. Энергетические характеристики и критические напряжения миграции границ зерен в деформируемых нанокристаллических материалах с нанодвойниками

Рассмотрим энергетические характеристики процесса совместной миграции границы зерна AB и двойниковых границ CD и EF под действием внешнего сдвигового напряжения τ (Рис. 1). Миграция границы зерна AB характеризуется разностью энергий $\Delta W = W_2 - W_1$ (на единицу длины дисклинации), где W_1 - полная энергия исходной дефектной конфигурации, которая определяется деформационными двойниками $CDD'C'$ и $EFF'E'$ (моделируемыми квадруполями $\pm\omega$ -дисклинаций) (Рис. 1a), а W_2 - полная энергия дефектной системы после миграции границы зерна AB и двойниковых границ CD и EF (Рис. 1b). Таким образом, разность полных энергий $\Delta W = W_2 - W_1$ состоит из следующих слагаемых:

$$\Delta W = 2E_s'^{\omega} - 2E_s^{\omega} + E_s^{\Omega} + E_{int2} - E_{int1} + E_{int3} + E_{int4} - \Delta E_{\gamma} - E_{\Sigma\tau}, \quad (1)$$

где $2E_s^{\omega}$ и $2E_s'^{\omega}$ - собственные энергии квадруполей $\pm\omega$ -дисклинаций до и после миграции двойниковых границ CD и EF , соответственно; E_s^{Ω} - собственная энергия квадруполя $\pm\Omega$ -дисклинаций; E_{int1} и E_{int2} - энергии упругого взаимодействия между квадруполями $\pm\omega$ -дисклинаций до и после миграции двойниковых границ CD и EF , соответственно; E_{int3} и E_{int4} - энергии упругого взаимодействия между квадруполем $\pm\Omega$ -дисклинаций и квадруполями $\pm\omega$ -дисклинаций, моделирующими деформационные двойники $CDD'C'$ и $EFF'E'$, соответственно; ΔE_{γ} - разность энергий двойниковых границ CC' , DD' , EE' и FF' до и после миграции границ CD и EF ; $E_{\Sigma\tau}$ - суммарная работа внешнего сдвигового напряжения τ по перемещению границы зерна AB и двойниковых границ CD и EF на расстояние p .

Собственные энергии E_s^{ω} , E_s^{Ω} и $E_s'^{\omega}$ квадруполей даются известными формулами, соответственно [19]:

[22]. Другие параметры дефектной системы положим равными: толщину нанодвойников $h=5\text{ nm}$ и мощность квадруполя $\pm\omega$ -дисклинаций $\omega=39^\circ$. Зависимости $\Delta W(p)$ представлены на Рис. 2а,с, для случая высокоугловой границы $\Omega=30^\circ$, и на Рис. 2b,d, для случая малоугловой границы $\Omega=10^\circ$, при различных значениях размера зерна $d=50\text{ nm}$ (Рис. 2а,b) и $d=200\text{ nm}$ (Рис. 2с,d).

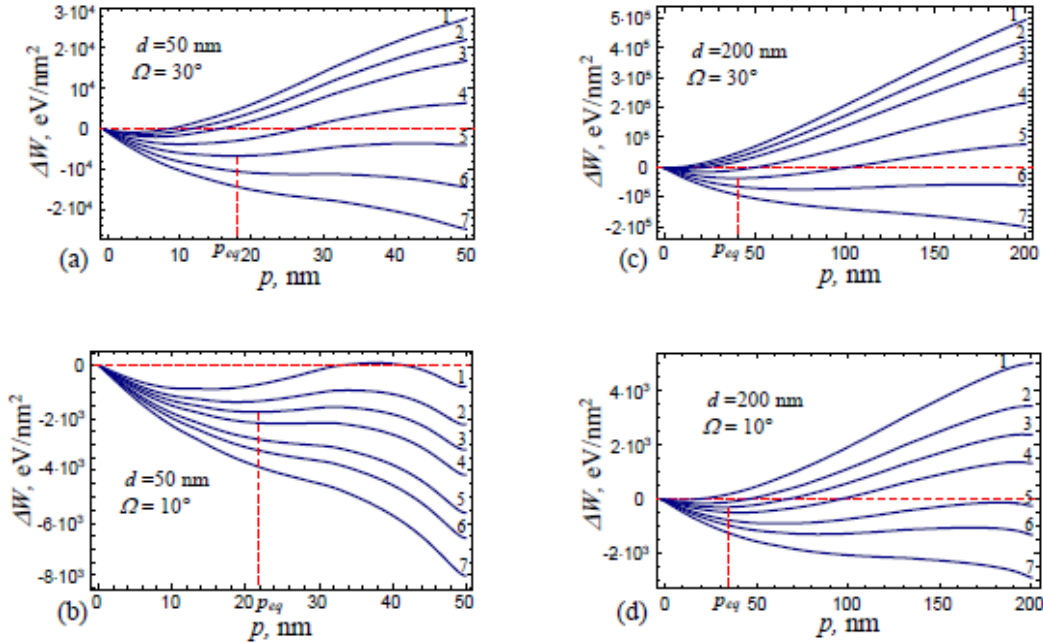


Рис. 2. Зависимость разности энергий ΔW от длины миграции p границы зерна при различных значениях внешнего напряжения τ , и размера зерна $d=50\text{ nm}$ (a,b) и $d=200\text{ nm}$ (c,d), для случая высокоугловой границы зерна $\Omega=30^\circ$ и $\tau=0$ (кривая 1), 0.5 (кривая 2), 1 (кривая 3), 2 (кривая 4), 3 (кривая 5), 4 (кривая 6), 5 (кривая 7) GPa (a,c), и для случая малоугловой зерна $\Omega=10^\circ$ и $\tau=0$ (кривая 1), 0.3 (кривая 2), 0.5 (кривая 3), 0.7 (кривая 4), 1 (кривая 5), 1.2 (кривая 6), 1.5 (кривая 7) GPa (b,d).

Как следует из зависимостей $\Delta W(p)$ на Рис. 2, начальный этап миграции, как высокоугловой ($p < 4\text{ nm}$) (Рис. 2а), так и малоугловой ($p < 12\text{ nm}$) (Рис. 2b) границы зерна AB является энергетически выгодным (разность энергий $\Delta W(p) < 0$ и монотонно убывает) при любых значениях внешнего сдвигового напряжения $\tau = \tau_{c1} \geq 0$. Критическое напряжение τ_{c1} задает напряжение старта миграции границы зерна. Увеличение длины миграции $p \geq 4\text{ nm}$ (для случая на Рис. 2а) и $p \geq 12\text{ nm}$ (для случая на Рис. 2b) границы зерна AB , характеризуется появлением на зависимостях $\Delta W(p)$ минимумов (кривые 1-6 на Рис. 2а и кривые 1-4 на Рис. 2b). По мере роста величины внешнего сдвигового напряжения τ на зависимостях $\Delta W(p)$ помимо точек минимума появляются точки максимума (кривая 5, 6 на Рис. 2а и кривые 1-4 на Рис. 2b). Точки минимума соответствуют положениям устойчивого равновесия границы зерна AB , то есть определяют равновесную длину p_{eq} миграции границы зерна AB . Длина равновесной миграции границы зерна AB задается уровнем внешнего напряжения τ , чем выше величина напряжения τ , тем больше равновесная длина миграции p_{eq} границы зерна (Рис. 2). Точки максимумов на зависимостях $\Delta W(p)$ определяют энергетические барьеры, которые препятствуют дальнейшей миграции границы зерна

AB при заданном уровне напряжения τ . При высоких значениях $\tau > \tau_{c2}$ зависимости $\Delta W(p)$ находятся в отрицательной области и монотонно убывают с увеличением длины p миграции границы зерна AB (кривая 7 на Рис. 2а и кривые 5-7 на Рис. 2б). В этом случае миграция границы зерна AB является неустойчивой. Критическое напряжение τ_{c2} определяет переход от устойчивого режима миграции границы зерна к неустойчивому режиму миграции границы зерна. Также, из зависимостей на Рис. 2 следует, что увеличение параметра разориентации Ω границы зерна AB приводит к значительному росту величины внешнего напряжения τ , требуемого для реализации процесса миграции границы зерна в теле зерна (Рис. 2). В то время как, увеличение размера зерна d способствует снижению уровню внешнего напряжения τ , необходимого для миграции границы зерна на заданное расстояние p (Рис. 2).

Оценим величины критических напряжений τ_{c1} и τ_{c2} , определяющих режимы миграции границы зерна AB . Старт миграции границы зерна AB (которому соответствует значение $p \leq 1 \text{ nm}$) возможно при выполнении условия $\Delta W(p=1 \text{ nm}) < 0$. Таким образом, критическое напряжение τ_{c1} , требуемое для старта миграции границы зерна AB , определяется выражением $\Delta W(p=1 \text{ nm}) = 0$.

Равновесная длина миграции p_{eq} , характеризующая устойчивый режим миграции границы зерна AB , задается точкой минимума на зависимостях $\Delta W(p)$ (Рис. 2). Неравенства $\partial \Delta W(p) / \partial p = 0$ и $\partial^2 \Delta W(p) / \partial p^2 > 0$ задают математические условия определения точек минимума на зависимостях $\Delta W(p)$. Используя эти неравенства и формулу для разности энергий ΔW (формулы (1)-(7)) запишем зависимость внешнего сдвигового напряжения τ от равновесной длины p_{eq} миграции границы зерна AB в следующем виде:

$$\tau(p_{eq}) = \frac{F(p_{eq})}{\Omega d + 2\omega h}, \quad (8)$$

где $F(p_{eq}) = \partial(2E_s'^{\omega} - 2E_s^{\omega} + E_s^{\Omega} + E_{int2} - E_{int1} + E_{int3} + E_{int4} - \Delta E_{\gamma}) / \partial p \Big|_{p=p_{eq}}$.

Построим зависимость $\tau(p_{eq})$ на примере нанокристаллической меди (Cu). Численный расчет зависимостей $\tau(p_{eq})$ представлен на Рис. 3а,с, для случая высокоугловой границы $\Omega = 30^\circ$, и на Рис. 3б,д, для случая малоугловой границы $\Omega = 10^\circ$ при различных наборах параметров d , ω и h , характеризующих средний размер нанозерен и деформационные нанодвойники $CDD'C'$ и $EFF'E'$ (Рис. 1). Напряжение τ соответствующие расстоянию $p_{eq} = 1 \text{ nm}$ считается критическим напряжением τ_{c1} старта миграции границы зерна. Точка максимума на зависимостях $\tau(p_{eq})$ соответствует максимальному напряжению $\tau = \tau_{c2}$, при котором реализуется устойчивый режим миграции границы зерна, а расстояние p'_{eq} является максимальной равновесной длиной миграции границы зерна (Рис. 3). Таким образом, точка (p'_{eq}, τ_{c2}) отделяет часть кривой $\tau(p_{eq})$, где выполняется неравенство $\partial^2 \Delta W(p) / \partial p^2 > 0$ (левая часть кривой) от части, где это неравенство не выполняется и соответствие τ и p_{eq} не является корректным (Рис. 3). При напряжениях $\tau > \tau_{c2}$ устойчивый режим миграции сменяется на неустойчивый режим миграции, при котором граница зерна не имеет

положений устойчивого равновесия и беспрепятственно мигрирует, пока не достигнет противоположной границы зерна. На Рис. 3 приведено сравнение совместной миграции границы зерна AB и двойниковых границ CD и EF (кривые 2-5 на Рис.3) с миграцией границы зерна AB при отсутствии нанодвойниковых прослоек $CDD'C'$ и $EFF'E'$ (то есть выполняются условия $\omega = 0$ и $\gamma_{TB} = 0$) (кривые 1 на Рис. 3).

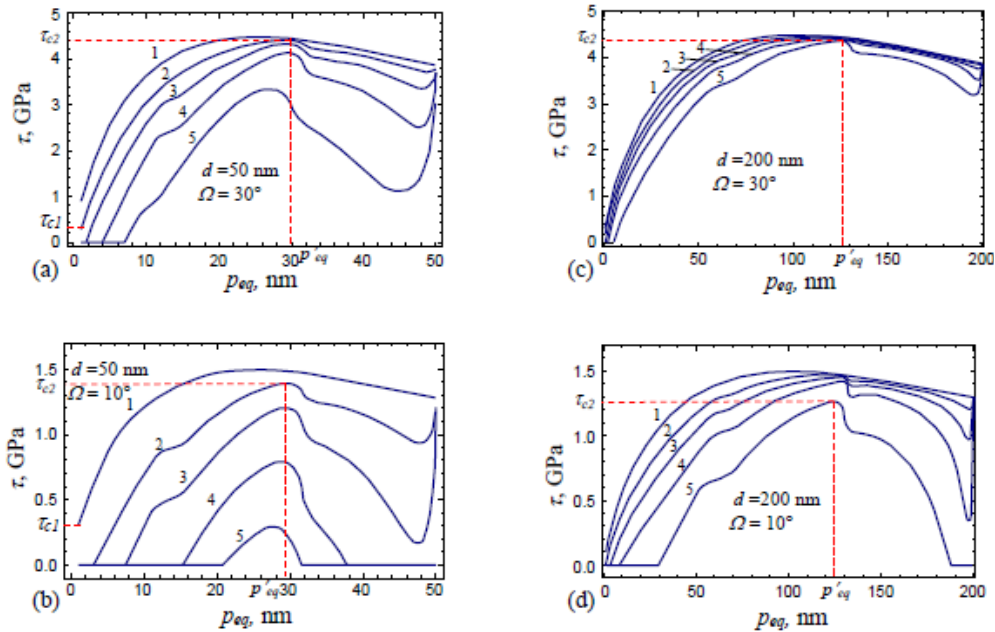


Рис. 3. Зависимость внешнего напряжения τ от равновесной длины миграции p_{eq} при одиночной миграции границы зерна (кривые 1) и совместной миграции границы зерна и двойниковых границ с различными параметрами $(\omega, h) = (5$ nm, $11^\circ)$ (кривые 2), $(5$ nm, $22^\circ)$ (кривые 3), $(5$ nm, $39^\circ)$ (кривые 4), $(10$ nm, $39^\circ)$ (кривые 5), для случая высокоугловой границы зерна $\Omega = 30^\circ$ (a,c), для случая малоугловой зерна $\Omega = 10^\circ$ (b,d), и для размеров зерна $d = 50$ nm (a,b) и $d = 200$ nm (c,d). Соответствие равновесной длины миграции p_{eq} напряжению τ является корректным в левой части кривых от точки (p'_{eq}, τ) .

Видно, что наличие деформационных нанодвойников существенным образом облегчает процесс миграции границы зерна AB . Причем, при увеличении мощности ω квадрупольей $CDD'C'$ и $EFF'E'$ и ширины h нанодвойниковых прослоек значительно снижается уровень внешнего напряжения τ , которое требуется для осуществления миграции границы AB . Так, величина критического напряжения $\tau_{c2} \approx 1.4$ GPa в случае $\omega = 11^\circ$, $h = 5$ nm (кривая 2 на Рис. 3b) и $\tau_{c2} \approx 0.3$ GPa в случае $\omega = 39^\circ$, $h = 10$ nm (кривая 5 на Рис. 3b), что является типичным значением для меди с нанокристаллической структурой. Также, следует отметить, что при совместной миграции границы зерна с двойниковыми границами устойчивая миграция границы зерна может осуществляться в отсутствие внешнего напряжения $\tau = \tau_{c1} = 0$ (кривые 3-5 на Рис. 3a и кривые 2-5 на Рис. 3b). В этом случае старт миграции границы зерна может реализовываться за счет термофлуктуаций. Величина внешнего напряжения τ , требуемого для осуществления миграции малоугловой границы зерна (Рис. 3b) в несколько раз ниже, чем напряжения необходимого для миграции высокоугловой границы зерна (Рис. 3a) при заданной длине p миграции.

4. Заключение

Таким образом, разработана теоретическая модель миграции границ зерен под действием внешнего напряжения в наноматериалах, содержащих нанодвойники. Показано, что в зависимости от величины внешнего напряжения τ могут реализовываться два режима миграции границы зерен – устойчивый режим, характеризуемый равновесной длиной миграции p_{eq} и неустойчивый режим, при котором граница способна мигрировать пока не достигнет препятствия (например, противоположной границы зерна $p = d$). Определены критические напряжения τ_{c1} и τ_{c2} реализации этих двух режимов. При $\tau_{c1} \leq \tau < \tau_{c2}$ реализуется устойчивый режим миграции границы зерен. В случае $\tau > \tau_{c2}$ миграция границы зерна происходит в неустойчивом режиме. Проведено сравнение миграции границы зерен, к которой примыкают двойниковые границы и миграции границы зерен в отсутствие двойников. Показано, что миграция границы зерен значительно облегчается за счет присутствия деформационных нанодвойников в прилегающем к мигрирующей границе зерне. Было показано, что при определенных параметрах нанодвойников миграция границы зерен может реализовываться в отсутствие внешней механической нагрузки.

Данная работа выполнена при поддержке (для И.А.О.) Министерства образования и науки РФ (Задание № 9.1964.2014/К) и (для Н.В.С.) Санкт-Петербургского государственного университета (грант 6.37.671.2013).

Литература

- [1] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.L. Wu // *Progress in Materials Science* **57** (2012) 1.
- [2] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov // *Applied Physics Letters* **84** (2004) 592.
- [3] X.L. Wu, E. Ma // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 061905.
- [4] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu // *Applied Physics Letters* **83** (2003) 5062.
- [5] Y. Wang, M. Chen, F. Zhou, E. Ma // *Nature* **419** (2002) 912.
- [6] A.K. Mukherjee // *Materials Science and Engineering A* **322** (2002) 1.
- [7] Yu.R. Kolobov, G.P. Grabovetskaya, I.V. Ratochka, K.V. Ivanov // *Nanostructured Materials* **12** (1999) 1127.
- [8] A.A. Fedorov, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Scripta Materialia* **47** (2002) 51.
- [9] M. Ke, W.W. Milligan, S.A. Hackney, J.E. Carsley, E.C. Aifantis // *Nanostructured Materials* **5** (1995) 689.
- [10] K.E. Harris, V.V. Singh, A.H. King // *Acta Materialia* **46** (1998) 2623.
- [11] T.J. Rupert, D. S. Gianola, Y. Gan, K.J. Hemker // *Science* **326** (2009) 1686.
- [12] J.W. Cahn, Y. Mishin, A. Suzuki // *Acta Materialia* **54** (2006) 4953.
- [13] M. Jin, A.M. Minor, E. A. Stach, J.W. Morris Jr. // *Acta Materialia* **52** (2004) 5381.
- [14] W.A. Soer, J.T.M. De Hosson, A.M. Minor, J. W. Moris, E.A. Stach // *Acta Materialia* **52** (2004) 5783.
- [15] 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.
- [16] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **87** (2005) 251916.
- [17] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **52** (2004) 3793.
- [18] M. Winning, G. Gottstein, L.S. Shvindlerman // *Acta Materialia* **50** (2002) 353.
- [19] В.И. Владимиров, А.Е. Романов, *Дисклинации в кристаллах* (Наука, Л., 1986).
- [20] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Journal of Physics D: Applied Physics* **47** (2014) 015307.

- [21] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Reviews on Advanced Materials Science* **37** (2014) 29.
[22] R. Niu, K. Han // *Scripta Materialia* **68** (2013) 960.

INFLUENCE OF NANOTWINS ON STRESS-DRIVEN MIGRATION OF GRAIN BOUNDARIES IN DEFORMED NANOMATERIALS

I.A. Ovid'ko^{1,2,3*}, N.V. Skiba^{1,2,3}

¹Research Laboratory for Mechanics of New Nanomaterials,

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

²Department of Mathematics and Mechanics, St. Petersburg State University,

Universitetskii pr. 28, Staryi Peterhof, St. Petersburg, 198504, Russia

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

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

Abstract. A theoretical model is suggested which describes grain boundary migration under external mechanical load in nanomaterials containing ensembles of nanotwins. In the framework of the model, a disclination description of stress-driven migration of grain boundaries in grains initially containing nanotwins. The energy characteristics and critical stresses for such a migration process are calculated. These critical stresses are compared with those specifying needed for stress-driven migration of grain boundaries in the absence of nanotwing in the exemplary cases of nanocrystalline and ultrafine-grained copper.

Acknowledgements

This work was supported, and, in part (for IAO), by the Russian Ministry of Education and Science (Zadanie № 9.1964.2014/K) and, in part (for NVS), by St. Petersburg State University (research grant 6.37.671.2013).

References

- [[1] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.L. Wu // *Progress in Materials Science* **57** (2012) 1.
[2] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunerov // *Applied Physics Letters* **84** (2004) 592.
[3] X.L. Wu, E. Ma // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 061905.
[4] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu // *Applied Physics Letters* **83** (2003) 5062.
[5] Y. Wang, M. Chen, F. Zhou, E. Ma // *Nature* **419** (2002) 912.
[6] A.K. Mukherjee // *Materials Science and Engineering A* **322** (2002) 1.
[7] Yu.R. Kolobov, G.P. Grabovetskaya, I.V. Ratochka, K.V. Ivanov // *Nanostructured Materials* **12** (1999) 1127.
[8] A.A. Fedorov, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Scripta Materialia* **47** (2002) 51.
[9] M. Ke, W.W. Milligan, S.A. Hackney, J.E. Carsley, E.C. Aifantis // *Nanostructured Materials* **5** (1995) 689.

- [10] K.E. Harris, V.V. Singh, A.H. King // *Acta Materialia* **46** (1998) 2623.
- [11] T.J. Rupert, D. S. Gianola, Y. Gan, K.J. Hemker // *Science* **326** (2009) 1686.
- [12] J.W. Cahn, Y. Mishin, A. Suzuki // *Acta Materialia* **54** (2006) 4953.
- [13] M. Jin, A.M. Minor, E. A. Stach, J.W. Morris Jr. // *Acta Materialia* **52** (2004) 5381.
- [14] W.A. Soer, J.T.M. De Hosson, A.M. Minor, J. W. Moris, E.A. Stach // *Acta Materialia* **52** (2004) 5783.
- [15] 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.
- [16] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **87** (2005) 251916.
- [17] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **52** (2004) 3793.
- [18] M. Winning, G. Gottstein, L.S. Shvindlerman // *Acta Materialia* **50** (2002) 353.
- [19] A. E. Romanov, V. I. Vladimirov, in *Dislocations in Solids*, edited by F. R. N. Nabarro, (North Holland, Amsterdam, 1992), Vol. 9, p. 191.
- [20] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Journal of Physics D: Applied Physics* **47** (2014) 015307.
- [21] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Reviews on Advanced Materials Science* **37** (2014) 29.
- [22] R. Niu, K. Han // *Scripta Materialia* **68** (2013) 960.