

АККОМОДАЦИЯ ЗЕРНОГРАНИЧНОГО СКОЛЬЖЕНИЯ ПОСРЕДСТВОМ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ДЕФОРМИРУЕМЫХ НАНОМАТЕРИАЛАХ

С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько*

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
Большой пр., В.О., 61, Санкт-Петербург, 199178, Россия

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

Аннотация. Предлагается и теоретически исследуется новый механизм аккомодации зернограничного скольжения (ЗГС) в деформируемых нанокристаллических металлах и керамиках, а именно стимулированная напряжением миграция границ зерен (ГЗ). В рамках предлагаемого подхода ЗГС и миграция ГЗ обеспечивают взаимную аккомодацию, что обуславливает интенсификацию данных процессов и повышает пластичность нанокристаллического материала. Рассчитаны условия, при которых оба процесса совместно реализуются в наноскопических зернах в атермическом режиме.

Уникальные механические свойства (сверхпрочность, сверхтвердость и др.) нанокристаллических металлов и керамик связывают с особенностями их наноструктуры, задающих действие специфических микромеханизмов пластической деформации [1,2]. Одним из таких микромеханизмов является ЗГС, которое, в частности, доминирует при сверхпластической деформации нанокристаллических материалов (наноматериалов) [1,2]. ЗГС представляет собой пластические сдвиги, которые локализованы в ГЗ и создают дефекты – источники внутренних напряжений – в тройных стыках ГЗ [1,3,4]. Такие дефекты способны инициировать зарождение нанотрещин [1,3,4] и последующее хрупкое разрушение наноматериала [4]. В случае же эффективной аккомодации ЗГС созданные им дефекты трансформируются и перестают быть опасными источниками напряжений, что повышает пластичность наноматериала. Это обуславливает большой интерес к выявлению природы аккомодации ЗГС в наноматериалах с учетом особенностей их наноструктуры [1,2,5]. К числу механизмов аккомодации ЗГС в наноматериалах относят эмиссию решеточных дислокаций из тройных стыков ГЗ [1,5], диффузию [6] и ротационную деформацию [7]. В настоящей работе предлагается и теоретически исследуется новый механизм аккомодации ЗГС в наноматериалах, а именно стимулированная напряжением миграция ГЗ. При этом ЗГС и миграция ГЗ реализуются совместно, обеспечивая эффективную взаимную аккомодацию.

В рамках предлагаемой модели ЗГС и миграция ГЗ в деформируемом наноматериале реализуются как единый двухстадийный процесс (рис. 1). Исходная конфигурация ГЗ в фрагменте наноматериала обозначена как конфигурация I на рис. 1. Тройные стыки ГЗ *A* и *B* конфигурации I являются полностью скомпенсированными. Под действием приложенного сдвигового напряжения τ на первой стадии происходит ЗГС (конфигурация II на рис. 1). Согласно теории [3,4], ЗГС приводит к формированию диполя клиновых дисклинаций *AC* с плечом равным расстоянию *x* проскальзывания (сдвига) зерен

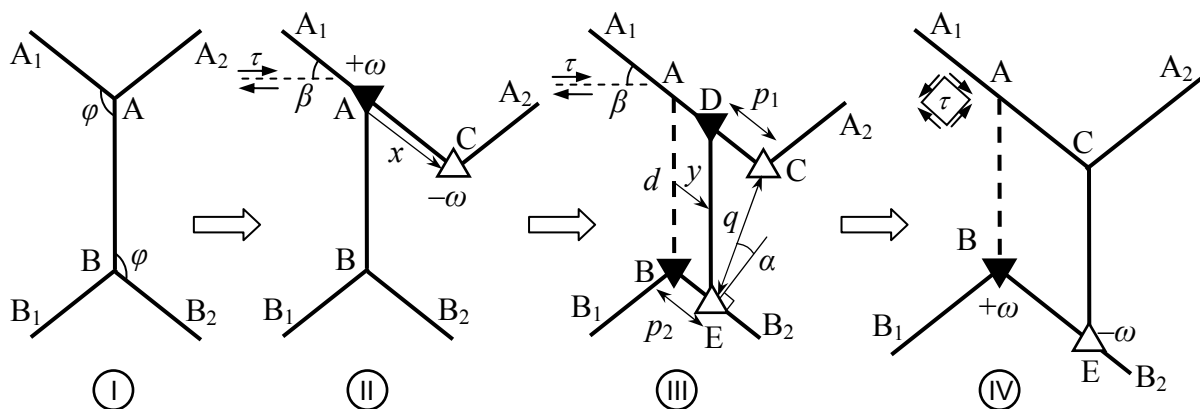


Рис. 1. Модель совместного зернограничного скольжения и миграции границы зерна. Показаны последовательные конфигурации границ зерен: I – исходное состояние; II – зернограничное скольжение приводит к зарождению диполя клиновых дисклинаций AC мощностью $\pm\omega$; III – миграция границы зерна AB в новое положение DE приводит к формированию второго дисклинационного диполя BE и одновременно к уменьшению плеча первого диполя (DC), мощность обоих диполей одинакова; IV – состояние, в котором верхний диполь исчезает в результате уменьшения его плеча до нуля и взаимной аннигиляции дисклинаций.

относительно друг друга. Мощность ω дисклинаций диполя равна по модулю углу разориентировки границы AB, которую для определенности мы полагаем симметричной границей наклона. Отметим, что такой диполь дисклинаций может инициировать зарождение трещины, т.е. служить наноскопическим очагом разрушения [3,4]. На второй стадии (конфигурация III) рассматриваемого процесса осуществляется стимулированная напряжением миграция вертикальной ГЗ на расстояние y из исходного положения AB (показано пунктиром на рис. 1) в новое положение DE. Такая миграция, согласно теории [8,9], приводит к формированию второго диполя дисклинаций BE (имеющего такую же мощность ω , как и первый) и, одновременно, к уменьшению плеча первого диполя DC. Здесь для простоты рассматривается конфигурация ГЗ, в которой при миграции ГЗ ее длина не изменяется, что реализуется, если ГЗ AA₁ и BB₂ параллельны друг другу.

Отметим, что рассматриваемый процесс (рис. 1) разделен на две стадии для наглядности; в реальности, в общем случае, ЗГС и миграция ГЗ происходят одновременно. В ходе совместной реализации ЗГС и миграция ГЗ обеспечивают взаимную аккомодацию, что, как показано ниже, энергетически предпочтительнее реализации «чистого» ЗГС. В частном случае в результате рассматриваемого процесса может образоваться конфигурация IV (рис. 1), в которой верхний диполь исчезает.

Рассчитаем характеристическое изменение ΔW полной энергии системы при ее трансформации из начальной конфигурации (I) в конфигурацию (III) (рис. 1). Учитывая, что в начальной конфигурации (I) дисклинационные дефекты отсутствуют, энергия ΔW представима в виде:

$$\Delta W = W_1 + W_2 + W_{int} - A. \tag{1}$$

Здесь W_i ($i = 1,2$) – собственная энергия первого и второго дисклинационных диполей соответственно, W_{int} – энергия взаимодействия диполей между собой, A – работа внешнего напряжения τ , затраченная на ЗГС и миграцию ГЗ. Если обозначить плечи дисклинационных диполей как p_1 и p_2 , то собственные энергии W_i записываются как [10]:

$$W_i = \frac{D\omega^2 p_i^2}{2} \left(\ln \frac{R}{p_i} + \frac{1}{2} \right), \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, R – радиус экранирования полей напряжений дисклинаций. Энергия взаимодействия W_{int} двух диполей дисклинаций одинаковой мощности ω с плечами p_1 и p_2 (рис. 1) находится стандартным методом [11] как работа по зарождению одного дефекта в поле другого. Опуская промежуточные расчеты, приведем окончательное выражение для W_{int} :

$$W_{int} = \frac{D\omega^2}{2} \left(L_1^2 \ln \frac{R}{L_1} + L_2^2 \ln \frac{R}{L_2} - L_{12}^2 \ln \frac{R}{L_{12}} - q^2 \ln \frac{R}{q} + 2p_1 p_2 \right), \quad (3)$$

где $L_1 = \sqrt{p_1^2 + 2p_1 q \sin \alpha + q^2}$, $L_2 = \sqrt{p_2^2 - 2p_2 q \sin \alpha + q^2}$, $L_{12} = \sqrt{(p_1 - p_2)^2 + 2(p_1 - p_2)q \sin \alpha + q^2}$. Здесь q – расстояние между отрицательными дисклинациями диполей, а α – угол между линией, соединяющей отрицательные дисклинации, и нормалью к ГЗ, на которой лежит диполь BE (рис. 1). Из геометрии конфигурации III (рис. 1) следует, что $q = \sqrt{p_1^2 + 2p_1 d \cos \varphi + d^2}$ и $\alpha = \varphi - \pi/2 - \arcsin(p_1 \sin \varphi / q)$. Длину отрезка AB (см. рис. 1) мы обозначаем d и принимаем за размер зерна. Угол φ показан на рис. 1 в исходном состоянии I.

Работа A внешнего напряжения τ для трансформации из конфигурации I в конфигурацию III состоит из двух слагаемых $A = A_1 + A_2$, где A_1 – работа, затраченная на ЗГС, а A_2 – работа, затраченная на миграцию ГЗ. Обозначим смещение в результате ЗГС как x , а расстояние миграции ГЗ как y (см. рис. 1). Тогда $A_1 = \tau x d \cos 2\beta$ [3,5], где β – угол между плоскостью действия максимальных сдвиговых напряжений и направлением ЗГС и миграции ГЗ (рис. 1), а работа A_2 (в рамках представления мигрирующей симметричной границы наклона AB распределением краевых дислокаций с векторами Бюргера перпендикулярными плоскости границы) может быть выражена как $A_2 = \tau \omega d y \sin \varphi \cos 2\beta$. Тогда общая работа есть

$$A = \tau d (x + \omega y \sin \varphi) \cos 2\beta. \quad (4)$$

В итоге из (1)–(4) имеем:

$$\Delta W = \frac{D\omega^2}{2} \left[p_1^2 \ln \frac{R}{p_1} + p_2^2 \ln \frac{R}{p_2} + L_1^2 \ln \frac{R}{L_1} + L_2^2 \ln \frac{R}{L_2} - L_{12}^2 \ln \frac{R}{L_{12}} - q^2 \ln \frac{R}{q} + \frac{(p_1 + p_2)^2}{2} \right] - \tau d (x + \omega y \sin \varphi) \cos 2\beta. \quad (5)$$

С учетом данных выше определений для x и y легко видеть (см. рис. 1), что $p_1 = x - y$, $p_2 = y$ и $x \geq y$.

Формула (5) задает ΔW как функцию двух переменных x и y . Поэтому ее удобно анализировать с помощью карт энергии. На рис. 2 представлена типичная карта энергии ΔW (в единицах $10^{-2} D d^{-2}$), рассчитанная в диапазоне значений $x \leq d$ и $y \leq x$, для следующих значений параметров: $R = 3d$, $\varphi = 2\pi/3$, $\beta = 0$, $\tau = 0.05D$, $\omega = 0.3$. Согласно рис. 2, имеется минимум (обозначен точкой M_1) энергии ΔW при некоторых значениях x_0 и y_0 . Причем энергетический барьер на пути К из начальной точки ($x = 0, y = 0$) в точку M_1 отсутствует, т.е. обсуждаемый процесс (рис. 1) является безбарьерным. Данный процесс совместной реализации ЗГС и миграции ГЗ энергетически

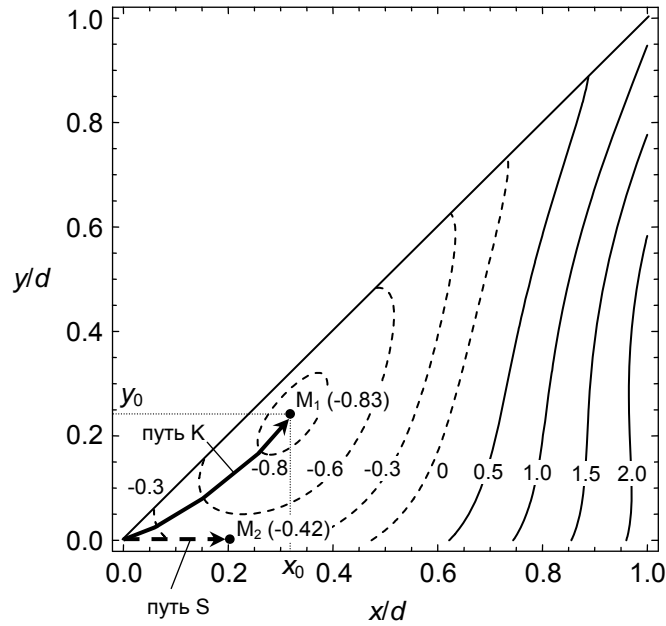


Рис. 2. Карты изменения энергии $\Delta W(x, y)$, рассчитанные в диапазоне значений $x \leq d$ и $y \leq x$, для следующих значений параметров: $R = 3d$, $\varphi = 2\pi/3$, $\tau = 0.05D$ и $\omega = 0.3$. Значения ΔW приведены в единицах $10^{-2} D d^2$.

предпочтительнее «чистого» ЗГС (без миграции ГЗ), который соответствует пути S на рис. 2, для которого энергетический минимум находится в точке M_2 .

Расчет выше сделан в предположении $\beta = 0$, т.е. в случае наиболее благоприятной ориентации рассматриваемой системы относительно приложенного напряжения. Поскольку оба рассматриваемых механизма деформации (ЗГС и миграция ГЗ) характеризуются одним и тем же выделенным направлением сдвига и, поэтому, зависят от ориентации напряжения τ одинаковым образом, изменение угла β эквивалентно изменению (уменьшению) эффективного действующего напряжения вдоль направления деформации в соответствии с формулой (5). При углах $45^\circ < \beta \leq 90^\circ$ это эффективное напряжение становится отрицательным и оба механизма не реализуются, т.к. $\Delta W > 0$ при любых значениях остальных параметров.

С механизмами ЗГС и миграции ГЗ связана локальная пластическая деформация $\varepsilon^* = \varepsilon_{gbs} + \varepsilon_{mig}$, где ε_{gbs} – деформация ЗГС, ε_{mig} – деформация, задаваемая миграцией ГЗ. Локальная деформация ЗГС в масштабах отдельного зерна определяется как $\varepsilon_{gbs} = x_0/d$ [12]. Мигрирующая граница наклона с разориентировкой ω задает деформацию $\omega/2$ в той области материала, через которую она прошла. Поскольку доля площади зерна, заметаемая движущейся ГЗ равна y_0/d , средняя деформация в масштабах одного зерна $\varepsilon_{mig} = y_0\omega/(2d)$. Таким образом, $\varepsilon^* = (x_0 + y_0\omega/2)/d$. В реальном нанокристаллическом материале зерна ориентированы хаотически, т.е. отдельно взятые структурные элементы, подобные изображенному на рис. 1а, характеризуются случайным углом β ориентации относительно приложенного напряжения. Поэтому введем в рассмотрение усредненную по углу β пластическую деформацию:

$$\langle \varepsilon^* \rangle = (2/\pi) \int_0^{\pi/2} [(x_0 + y_0\omega/2)/d] d\beta, \quad (6)$$

где x_0 , y_0 определяются путем минимизации выражения (5) при заданных значениях τ и ω .

Используя формулы (5) и (6), мы рассчитали $\langle \varepsilon^* \rangle$ на примере нанокристаллической керамики 3C-SiC ($G = 217$ GPa, $\nu = 0.23$ [13]). Результаты расчетов приведены на рис. 3 в виде зависимостей $\langle \varepsilon^* \rangle$ (сплошные линии) от приложенного напряжения τ и $\omega = 0.3$ (рис. 3а) и от мощности диполей ω при $\tau = 2$ GPa (рис. 3б). Для сравнения также приведены кривые (пунктирные линии) соответствующие усредненной деформации $\langle \varepsilon_{gbs} \rangle$ «чистого» ЗГС. В предположении, что зернограничные процессы деформации (ЗГС и миграция ГЗ) доминируют и протекают однородно в наноматериале, кривые на рис. 3 свидетельствуют о значительном росте пластичности наноматериала при совместном действии ЗГС и миграции ГЗ по сравнению со случаем только ЗГС при любых значениях ω . Сам прирост деформации существенным образом зависит от ω (т.е. разориентировки мигрирующей границы), что легко видеть из рис. 3б, где $\langle \varepsilon^* \rangle$ больше $\langle \varepsilon_{gbs} \rangle$ на величину от 25% до 200% при изменении ω в диапазоне 0.2–0.8. При этом прочность материала не снижается, так как дисклинационные диполи в конфигурациях III и IV (рис. 1), реализующихся при совместном действии ЗГС и миграции ГЗ, не больше, чем в случае «чистого» ЗГС (конфигурация II). Т.е. в качестве потенциальных

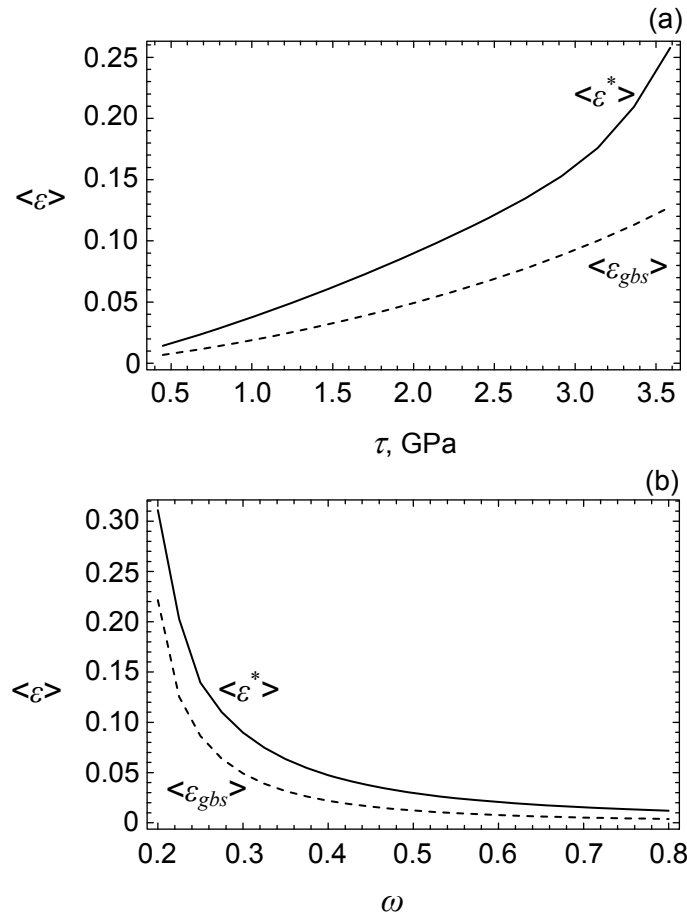


Рис. 3. Зависимости усредненной локальной пластической деформации в случае совместного действия ЗГС и миграции ГЗ (сплошные линии) и только действия ЗГС (пунктирные линии) в 3C-SiC от (а) приложенного напряжения τ при $\omega = 0.3$; (б) от мощности дисклинационных диполей ω при $\tau = 2$ GPa. Прочие параметры имеют значения $R = 3d$, $\varphi = 2\pi/3$.

центров трещинообразования они в худшем случае эквивалентны, а в лучшем – менее опасны.

Таким образом, стимулированная напряжением миграция ГЗ в теории способна аккомодировать ЗГС (рис. 1) в деформируемых наноматериалах. В частности, совместная реализация ЗГС и стимулированной напряжением миграции ГЗ в деформируемых наноматериалах является энергетически предпочтительным процессом по сравнению с «чистым» ЗГС. Показано, что пластичность наноматериала значительно возрастает при совместном действии ЗГС и миграции ГЗ по сравнению со случаем «чистого» ЗГС (локальная степень деформации при одинаковом приложенном напряжении растет на величины от 25% до 200% в зависимости от угла разориентировки мигрирующей ГЗ). Прочность материала при этом не снижается.

Результаты нашей модели согласуются с экспериментальными данными о наблюдении стимулированной напряжением миграции ГЗ в деформируемых наноматериалах (см. обзор [14]). Отметим также, что ЗГС является доминирующим механизмом сверхпластической деформации в наноматериалах [1,2,6] и микрокристаллических материалах [15], а также вносит значимый вклад в пластическую деформацию наноматериалов со сверхмалыми размерами зерен $d < 10\text{--}30\text{ nm}$ [1,2,16]. Во всех этих случаях, согласно результатам нашей модели, миграция ГЗ способна аккомодировать ЗГС, что подавляет зарождение нанотрещин и повышает пластичность наноматериала. В крупнозернистых поликристаллах ЗГС обычно не реализуется, и наша модель неприменима.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0353), Совета по грантам Президента Российской Федерации (грант МК-1702.2010.1), Программы Президиума РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов» и РФФИ (грант № 08-01-00225-а).

Список литературы

- [1] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications*, (Cambridge: Cambridge University Press, 2007).
- [2] Р.А. Андриевский, А.М. Глезер // *УФН* **179** (2009) 337.
- [3] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phys. Rev. B* **77** (2008) 054109.
- [4] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, Yu.V. Petrov, A.G. Sheinerman // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **19** (2009) 63.
- [5] A.K. Mukherjee // *Mater. Sci. Eng. A.* **322** (2002) 1.
- [6] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **57** (2009) 2217.
- [7] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **19** (2009) 103.
- [8] М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 251916.
- [9] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман // *Доклады Академии Наук* **419** (2008) 184.
- [10] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. *Дисклинации в кристаллах*, (Л.: Наука, 1986, 224 с.).
- [11] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*, (Dordrecht: Nijhoff, 1987).
- [12] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 171927.
- [13] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2004) 184117.
- [14] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.Th.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [15] T.G. Langdon // *J. Mater. Sci.* **41** (2006) 597.
- [16] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progr. Mater. Sci.* **54** (2009) 689.

ACCOMMODATION OF INTERGRAIN SLIDING THROUGH GRAIN BOUNDARY MIGRATION IN DEFORMED NANOMATERIALS

S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko

Abstract. A new micromechanism for accommodation of intergrain sliding in nanocrystalline metals and ceramics is suggested and theoretically described. The micromechanism represents the stress-driven migration of grain boundaries. In the framework of the suggested approach, intergrain sliding and stress-driven migration of grain boundaries accommodate each other, in which both these processes are intensified, and their combined action enhances ductility of a nanocrystalline material. We calculated the conditions at which intergrain sliding and stress-driven migration of grain boundaries cooperatively occur in nanoscopic grains in the athermal regime.

References

- [1] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications*, (Cambridge: Cambridge University Press, 2007).
- [2] R.A. Andrievski, A.M. Glezer // *Physics-Uspekhi* **52** (2009) 315.
- [3] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phys. Rev. B* **77** (2008) 054109.
- [4] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, Yu.V. Petrov, A.G. Sheinerman // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **19** (2009) 63.
- [5] A.K. Mukherjee // *Mater. Sci. Eng. A.* **322** (2002) 1.
- [6] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **57** (2009) 2217.
- [7] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **19** (2009) 103.
- [8] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 251916.
- [9] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Doklady Physics* **419** (2008) 144.
- [10] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro (North Holland, Amsterdam, 1992), Vol. 9, p.191.
- [11] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*, (Dordrecht: Nijhoff, 1987).
- [12] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 171927.
- [13] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2004)184117.
- [14] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.Th.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [15] T.G. Langdon // *J. Mater. Sci.* **41** (2006) 597.
- [16] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progr. Mater. Sci.* **54** (2009) 689.