

# ПРОЦЕССЫ ЗАРОЖДЕНИЯ НОВЫХ НАНОСКОПИЧЕСКИХ ЗЕРЕН ВБЛИЗИ ВЕРШИН ТРЕЩИН В ДЕФОРМИРУЕМЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

И.А. Овидько<sup>1,2\*</sup>, Н.В. Скиба<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
Большой пр. 61, В.О., Санкт-Петербург 199178, Россия

<sup>2</sup> Математико-механический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет,  
Университетский пр. 28, Старый Петергоф, Санкт-Петербург 198504, Россия

\*email: ovidko@gmail.com

**Аннотация.** Разработана теоретическая модель, которая описывает зарождение новых наноскопических зерен вблизи вершин трещин в нанокристаллических керамиках и металлах при механическом нагружении. В рамках модели наноскопические границы зерен под действием высоких сдвиговых напряжений вблизи вершин трещин расщепляются на неподвижные и подвижные границы зерен. Миграция подвижных границ зерен, содержащих диполи дисклинаций, приводит к зарождению наноскопических зерен (моделируемых как параллелограммы в 2-мерных нанокристаллических структурах) вблизи вершин трещин. Такой процесс зарождения наноскопических зерен представляет собой особую моду ротационной пластической деформации и приводит к частичной релаксации высоких локальных напряжений вблизи вершин трещин. Последнее обуславливает увеличение трещиностойкости нанокристаллических керамик и металлов.

## 1. Введение

Нанокристаллические керамики и металлы обладают уникальными механическими свойствами, которые представляют интерес для фундаментальных исследований и имеют высокую технологическую значимость (см., например, [1-7]). Нанокристаллические материалы обычно имеют высокую твердость, прочность и износостойкость. Вместе с тем, нанокристаллические керамики и металлы в подавляющем числе случаев характеризуются низкими показателями пластичности и трещиностойкости [1-7], которые крайне нежелательны для их практических приложений. В частности, низкая трещиностойкость нанокристаллических керамик представляет собой основной фактор, препятствующий широкому технологическому применению таких керамик [1, 5]. Низкая трещиностойкость нанокристаллических керамик и металлов связывается с подавлением обычных микромеханизмов торможения трещин (прежде всего, торможения трещин за счет их затупления при испускании дислокаций из вершин трещин [8, 9]), вследствие особенностей нанокристаллической структуры [10, 11]. Вместе с тем, известны несколько примеров получения высокопрочных нанокристаллических керамик с достаточно высокими показателями трещиностойкости [1, 12-15]. Природа сочетания высокой прочности и функциональной трещиностойкости таких нанокристаллических керамик



позволяет нам значительно упростить математический анализ поставленной задачи (теоретического описания зарождения нанозерен и их влияния на рост трещин в нанокристаллических материалах), сводя задачу к рассмотрению 2-мерной структуры. В тоже время, 2-мерный случай определенно отражает все основные аспекты задачи.

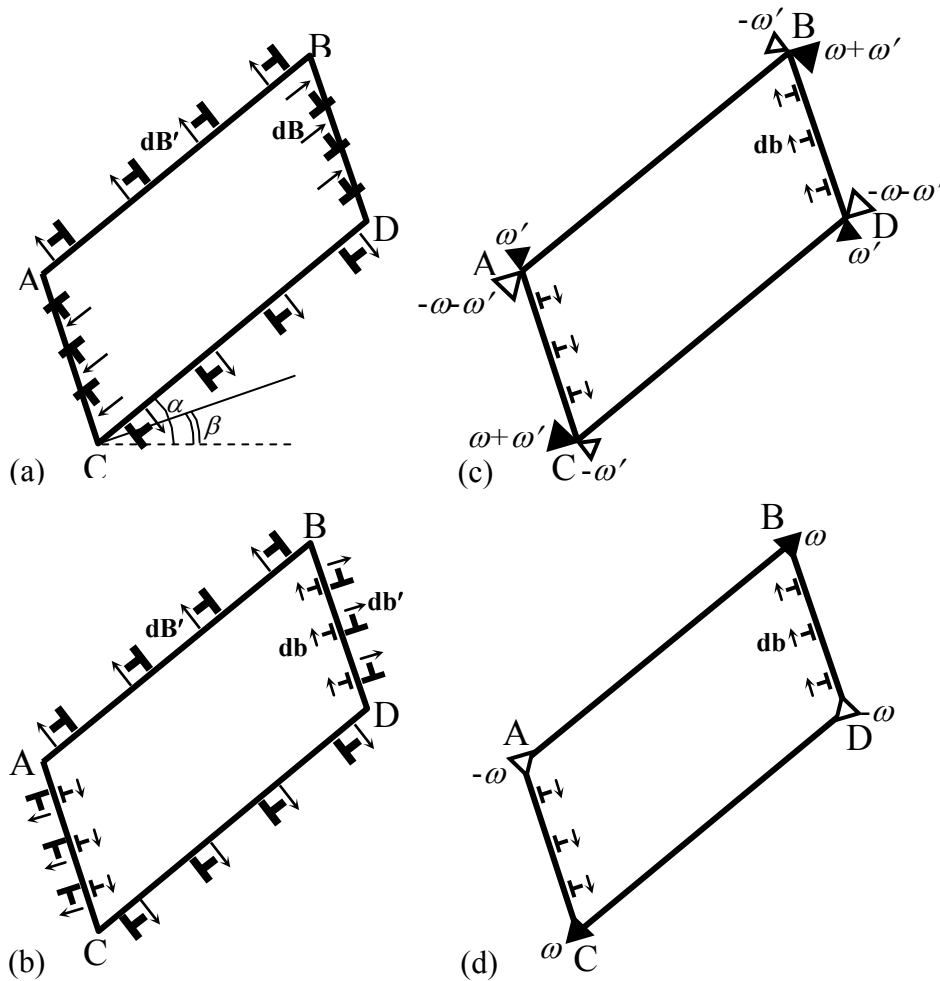
Также предполагается, что трещина ориентирована перпендикулярно направлению действию внешней нагрузки  $\sigma_0$ , то есть является трещиной нормального отрыва (Рис. 1). Такая геометрия трещины наиболее опасна для целостности деформируемого образца. В системе координат, изображенной на Рис. 1, трещина распространяется вдоль оси  $x$  и расположена в области  $0 < x < l$ . Также, в рамках модели нанокристаллический образец представляет собой упруго-изотропное твердое тело, которое характеризуется модулем сдвига  $G$  и коэффициентом Пуассона  $\nu$ .

Пусть  $\sigma_{ij}^c$  - есть поле напряжений, создаваемое внешней нагрузкой  $\sigma_0$  в материале с трещиной. Предполагается, что действие компоненты  $\sigma_{xy}^c$  сдвигового напряжения может привести к зарождению нового зерна наноскопического размера вблизи вершины трещины (Рис. 1). В рамках подхода, предложенного в работах [24, 25], зарождение нанозерен может служить специфическим микромеханизмом деформации, который реализуется в три этапа: (i) расщепление фрагмента  $A'C'$  границы зерна (этот фрагмент не показан на Рис. 1) на неподвижную границу  $AC$  (расположенную в том же месте, что и фрагмент  $A'C'$ ) и подвижную границу  $BD$ ; (ii) миграция границы зерна  $BD$ ; (iii) образование двух новых границ зерен  $AB$  и  $CD$  (Рис. 1). Рост зерен, осуществляемый за счет миграции границ зерен, связан с пластическим сдвигом в нанокристаллических материалах [24, 25] таким же образом, как и индуцируемая напряжением миграция границы зерна [17, 18, 26] (границы зерна  $BD$  в рассматриваемом случае). При этом пластическому сдвигу в наноскопической области, окруженной пластически недеформированным материалом, препятствует этот окружающий материал. В результате пластический сдвиг является незавершенным и приводит к образованию пластической несовместности и соответствующих упругих полей. Последние в духе подхода [24, 25] эффективно моделируется как упругие поля двух диполей клиновых дисклинаций с мощностями  $\pm \omega$  (Рис. 1). Новое зерно  $ABCD$  может иметь форму прямоугольника или параллелограмма в зависимости от формы области, «заметаемой» границей  $BD$  при ее миграции.

В статье [23] теоретически исследовался процесс зарождения наноскопических зерен, имеющих форму прямоугольника, вблизи вершин трещин в нанокристаллических материалах. В настоящей работе рассматривается более общая ситуация, а именно зарождение зерна, имеющего форму параллелограмма (Рис. 1) вблизи вершины трещины в нанокристаллическом образце. Зерно (параллелограмм) имеет наноскопические размеры  $s$  и  $p$ , которые также являются расстояниями между дисклинациями (Рис. 1). Ориентация зерна  $ABCD$  относительно плоскости трещины задается углами  $\alpha$  и  $\beta$  (Рис. 1). В рамках предлагаемой модели границы зерен  $AC$  и  $BD$  являются асимметричными границами наклона, а границы зерен  $AB$  и  $CD$  являются симметричными границами наклона и характеризуются углом разориентировки  $\omega'$  (который является параметром исследуемой дефектной структуры).

Каждая из асимметричных границ наклона  $AC$  и  $BD$  и симметричных границ наклона  $AB$  и  $CD$  может быть представлена в виде стенок непрерывно распределенных дислокаций с бесконечно малым вектором Бюргерса  $d\vec{B}$  и  $d\vec{B}'$ , соответственно (Рис. 2а). При этом Вектор Бюргерса  $d\vec{B}$  образует угол  $\alpha - \beta$  с плоскостью соответствующей границы (Рис. 2а). Каждая дислокация ряда, моделирующего асимметричную границу наклона  $AC$  или  $BD$  представима в виде суперпозиции двух

дислокаций, а именно дислокации с вектором Бюргерса  $\vec{db}$  ( $db$ -дислокации), который параллелен плоскости соответствующей границы зерен ( $AC$  или  $BD$ ), и дислокации с вектором Бюргерса  $\vec{db'}$  ( $db'$ -дислокации), который перпендикулярен плоскости соответствующей границы зерен ( $AC$  или  $BD$ ) (Рис. 2b). Таким образом, границы зерен  $AC$  и  $BD$  представляются в виде двух рядов  $db$ -дислокаций и двух стенок  $db'$ -дислокаций (Рис. 2b), модули векторов Бюргерса которых связаны с вектором Бюргерса  $\vec{dB}$  следующими выражениями:  $db = dB \sin(\alpha - \beta)$  и  $db' = dB \cos(\alpha - \beta)$ .



**Рис. 2.** Дислокационно-дисклинационное представление границ нового нанозерна. (a) Дислокационные модели асимметричных границ наклона  $AC$  и  $BD$  и симметричных границ наклона  $AB$  и  $CD$ . Асимметричные границы наклона  $AC$  и  $BD$  представимы в виде стенок  $\vec{dB}$ -дислокаций. Симметричные границы наклона  $AB$  и  $CD$  представимы в виде стенок  $\vec{dB'}$ -дислокаций. (b) Разложение стенок  $\vec{dB}$ -дислокаций на два ряда  $\vec{db}$ -дислокаций и две стенки  $\vec{db'}$ -дислокаций. (c) Представление стенок  $\vec{dB}$ -дислокаций и  $\vec{db'}$ -дислокаций в виде дисклинационных диполей с мощностями  $\omega'$  и  $\omega + \omega'$ , соответственно. (d) Дефектная структура, образовавшаяся в результате частичной компенсации разориентировок ассиметричных границ наклона  $AC$  и  $BD$  за счет симметричных границ наклона  $AB$  и  $CD$  в стыках A, B, C и D этих границ.

Стенки  $db'$ -дислокаций имеют конечную длину, т.е. являются оборванными дислокационными стенками. Согласно теории дефектов в твердых телах [27], каждая оборванная дислокационная стенка создает поля напряжений, эквивалентные полям напряжений диполя клиновых дисклинаций. Таким образом, стенки  $db'$ -дислокаций могут быть представлены в виде двух диполей клиновых дисклинаций мощностью  $\omega + \omega'$  (Рис. 2с). Аналогично стенки  $dB'$ -дислокаций, моделирующие симметричные границы наклона  $AB$  и  $CD$ , эквивалентны двум диполям клиновых дисклинаций мощностью  $\omega'$  (Рис. 2с). В этом случае вектор Бюргерса  $d\vec{B}$ -дислокаций связан с мощностью  $\omega + \omega'$  дисклинаций следующим выражением  $dB = (\omega + \omega')dp$ , а вектор Бюргерса рядов  $db$ -дислокаций - выражением  $db = (\omega + \omega')\sin(\alpha - \beta)dp$ . Дисклинации в стыках границ зерен А, В, С и D с мощностью  $\omega'$  (моделирующие симметричные границы наклона  $AB$  и  $CD$ ) имеют знак противоположный знаку дисклинаций с мощностью  $\omega + \omega'$  (моделирующих ассиметричные границы наклона  $AC$  и  $BD$ ) (Рис. 2с). В результате происходит частичная компенсация разориентировки  $\omega + \omega'$  ассиметричных границ наклона  $AC$  и  $BD$  за счет симметричных границ наклона  $AB$  и  $CD$  с разориентировкой  $\omega'$ , что эквивалентно образованию дефектной структуры, состоящей из двух дисклинационных диполей с мощностью  $\omega$  и двух рядов  $db$ -дислокаций (Рис. 2d).

Зарождение нанозерна (Рис. 1) характеризуется разностью энергий  $\Delta W = W_2 - W_1$ , где  $W_1$  – энергия системы в начальном состоянии, содержащем только трещину,  $W_2$  – энергия системы в конечном состоянии, содержащем трещину и новое наноскопическое зерно (нанозерно). Зарождение нанозерна энергетически выгодно при выполнении условия  $\Delta W < 0$ . Разность энергий  $\Delta W$  (на единицу длины вдоль оси  $z$ ) может быть записана в виде суммы трех слагаемых:

$$\Delta W = 2E^{\Delta} + 2E^b + E^{\Delta-\Delta} + E^{b-b} + E^{\Delta-\sigma} + \Delta E_{gb}, \quad (1)$$

где  $E^{\Delta}$  – собственная энергия дисклинационных диполей,  $E^b$  – собственная энергия рядов  $db$ -дислокаций,  $E^{\Delta-\Delta}$  – энергия взаимодействия между дисклинационными диполями,  $E^{b-b}$  – энергия взаимодействия между рядами  $db$ -дислокаций,  $E^{\Delta-\sigma}$  – суммарная энергия взаимодействия дисклинационных диполей и рядов  $db$ -дислокаций с полем сдвиговых напряжений  $\sigma_{ij}^c$ , созданных в теле с трещиной внешней нагрузкой  $\sigma_0$ ,  $\Delta E_{gb}$  – разность энергий границ зерен в конечном и начальном состояниях.

В первом приближении мы пренебрежем влиянием трещины на энергию дисклинационных диполей  $E^{\Delta}$  и для расчета этой энергии воспользуемся известным выражением [27] для энергии дисклинационного диполя в бесконечном изотропном теле:

$$E^{\Delta} = \frac{D\omega^2 p^2}{2} \left( \ln \frac{R}{p} + \frac{1}{2} \right). \quad (2)$$

Здесь  $D = G/2\pi(1-\nu)$ ,  $R$  – радиус экранирования полей напряжений, который принимается равным  $R = s \approx d$ , где  $d$  – размер зерна наноматериала.

Собственная энергия  $E^b$  дислокационного ряда  $db$ -дислокаций задается следующим образом [27]:

$$E^b = \frac{Db^2}{2} \left( \ln \frac{R}{r} + 1 \right), \quad (3)$$

где  $b = (\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta)p$  - суммарный вектор Бюргерса всех дислокаций ряда,  $r \approx b$  - суммарный радиус экранирования ядер всех  $db$ -дислокаций.

Энергия взаимодействия  $E^{\Delta-\Delta}$  между дисклинационными диполями  $AC$  и  $BD$  рассчитывается как работа по зарождению одного диполя в поле напряжений другого:

$$E^{\Delta-\Delta} = -\omega \int_{y'}^{y'+p} \int_{x'}^R \sigma_{xy}^{\Delta} dx dy, \quad (4)$$

где  $\sigma_{xy}^{\Delta}$  - сдвиговая компонента поля напряжений дисклинационного диполя  $AC$ ,  $x' = s \cos(\alpha - \beta)$ ,  $y' = s \sin(\alpha - \beta)$ .

Энергия взаимодействия  $E^{b-b}$  между рядами  $db$ -дислокаций  $AC$  и  $BD$  рассчитывается аналогичным образом как работа по зарождению одного ряда в поле напряжений другого. Для расчета этой энергии вычислим сдвиговую компоненту поля напряжений дислокационного ряда  $AC$ , используя известное выражение для поля напряжения краевой дислокации [27]:

$$\sigma_{xy}^{bb} = D(\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta) \int_0^p \frac{x(x^2 - (y - p')^2)}{(x^2 + (y - p')^2)^2} dp'. \quad (5)$$

С помощью формулы (5) получим выражение для энергии взаимодействия  $E^{b-b}$ :

$$E^{b-b} = -(\omega + \omega') \sin \alpha - \beta \int_{y'}^{y'+p} \int_{y'+p}^R \sigma_{xy}^{bb}(x = x') dy dp'. \quad (6)$$

Энергия  $E^{\Delta-\sigma}$  рассчитывается как работа по зарождению дисклинационных диполей и дислокационных рядов в поле внешнего напряжения вблизи вершины трещины (являющейся концентратором внешнего напряжения):

$$E^{\Delta-\sigma} = -\omega \left( \int_0^p \int_0^R \sigma_{xy}^c dx dy + \int_{y'}^{y'+p} \int_{x'}^R \sigma_{xy}^c dx dy \right) - \\ (\omega + \omega') \sin(\alpha - \beta) \left( \int_0^p \int_p^R \sigma_{xy}^c(x = 0) dy dp' + \int_{y'}^{y'+p} \int_{y'+p}^R \sigma_{xy}^c(x = x') dy dp' \right), \quad (7)$$

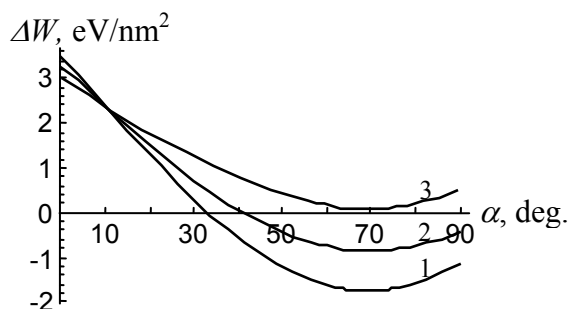
где  $\sigma_{xy}^c$  - компонента поля напряжений  $\sigma_{ij}^c$  (см. например [28]), созданного приложенной нагрузкой  $\sigma_0$  в твердом теле с трещиной в системе координат  $(x, y)$  (Рис. 4).

Разность энергий  $\Delta E_{gb}$  границ зерен задается формулой:  $\Delta E_{gb} = s\gamma_{AB} + p\gamma_{AC} + s\gamma_{CD} + p\gamma_{BD} - p\gamma_{A'C'}$ , где  $\gamma_{AB}$ ,  $\gamma_{AC}$ ,  $\gamma_{CD}$  и  $\gamma_{BD}$  - удельная энергия (на единицу площади плоскости границы зерна) новых границ зерен  $AB$ ,  $AC$ ,  $CD$  и  $BD$ , тогда как  $\gamma_{A'C'}$  представляет собой удельную энергию границы  $A'C'$  в

исходном состоянии (до зарождения нанозерна). В исследуемом случае мы предполагаем, что все рассматриваемые границы зерен являются высокоугловыми границами наклона. Для таких (широко распространенных) границ зерен, во многих материалах удельная энергия  $\gamma$  границ зерен является слабо возрастающей или примерно постоянной функцией параметра разориентировки  $\theta$  [29]. Как следствие, для простоты будем считать, что энергии всех границ зерен одинаковы:  $\gamma_{AB} = \gamma_{AC} = \gamma_{CD} = \gamma_{BD} = \gamma_{A'C'} = \gamma_b$ . В рамках данного предположения получаем:

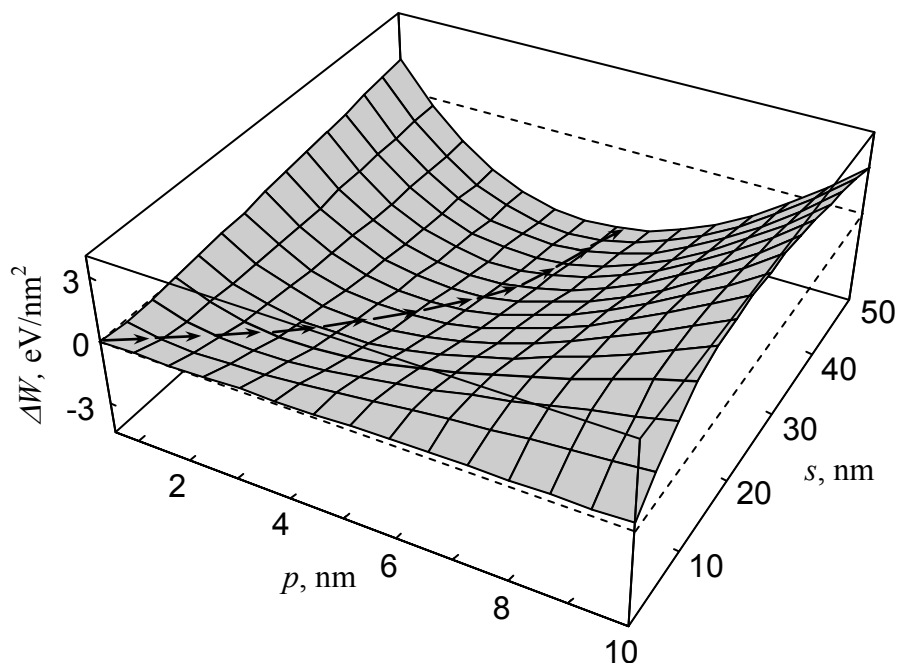
$$E_{gb} = \gamma_b(2s + p). \quad (8)$$

Формулы (1)-(8) позволяют рассчитать разность энергий  $\Delta W$ . На примере нанокристаллической керамики  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ , с помощью формул (1)-(8) построим зависимость разности энергий  $\Delta W$  от угла  $\alpha$  при различных значениях мощности  $\omega$  дисклинационных диполей. В расчетах, будем использовать следующие значения параметров для  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  [30]:  $G=169$  GPa,  $\nu=0.23$ ,  $\gamma=1,5$  J/m<sup>2</sup> [31],  $\gamma_b=0,5$  J/m<sup>2</sup> [32]. Внешнее напряжение  $\sigma_0$  положим равным 1 GPa, что характерно для большинства нанокристаллических керамик, а в качестве длины трещины  $L$  выберем значение  $L=800$  nm, которое близко (но немного меньше) к значению длины трещины Гриффитса в  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  при заданном уровне напряжений. Угол  $\beta$ , для простоты, положим равным  $\beta=0^\circ$ . В качестве размера зерна выберем значение  $d=50$  nm, тогда радиус экранирования равен  $R \approx d=50$  nm. Также, в качестве разориентировки  $\omega'$  границ  $AB$  и  $CD$  выберем значение  $\omega'=20^\circ$ . Из зависимостей на Рис. 3 видно, что зарождение нового нанозерна  $ABCD$  является наиболее энергетически выгодным вдоль направления задаваемого углом  $\alpha=70^\circ$ . Данный угол соответствует направлению действия максимального сдвигового напряжения вблизи вершины трещины нормального отрыва в твердом теле под действием растягивающей нагрузки. При этом увеличение мощности  $\omega$  дисклинационных диполей приводит к снижению энергетической выгоды образования нанозерна (Рис. 3).



**Рис. 3.** Зависимость характеристической разности энергий  $\Delta W$  от угла  $\alpha$  при различных значениях мощности  $\omega$  дисклинаций  $\omega=5^\circ$  (кривая 1),  $10^\circ$  (кривая 2) и  $15^\circ$  (кривая 3).

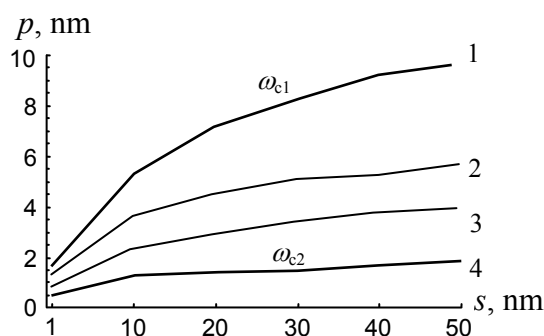
Далее построим зависимость разности энергий  $\Delta W$  от длин сторон  $s$  и  $p$  нового нанозерна при тех же параметрах системы и наиболее выгодном значении угла  $\alpha=70^\circ$  (как было показано выше). На Рис. 4 представлены расчеты зависимости  $\Delta W(s, p)$ , проведенные с помощью формул (1)-(8), для указанных параметров нанокристаллического  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ .



**Рис. 4.** Зависимость характеристической разности энергий  $\Delta W$  от размеров  $s$  и  $p$  нанозерна.

Стрелки на Рис. 4 показывают направление в пространстве  $(s, p)$ , вдоль которого образование/рост нового нанозерна сопровождается наибольшим выигрышем в энергии. Анализ зависимостей на Рис. 4 показывает, что рост нового нанозерна наиболее энергетически выгоден при одновременном увеличении сторон  $s$  и  $p$  нанозерна. Более точно, при каждом значении размера  $s$  равновесная форма нанозерна (параллелограмма) определяется некоторым равновесным значением размера  $p_{eq}$ , который рассчитан из условия минимума  $\Delta W(s, p)$  при данном  $s$ .

На Рис. 5 представлены зависимости  $p_{eq}(s)$  при различных значениях мощности  $\omega$  дисклинаций.



**Рис. 5.** Зависимость равновесного значения размера  $p_{eq}$  от размера  $s$  нанозерна при различных значениях мощности  $\omega$  дисклинаций  $\omega = 2, 7, 11$  и  $14^\circ$  (кривые 1, 2, 3 и 4, соответственно).

Из зависимостей на Рис. 5 следует, что равновесная форма нового нанозерна стремится к форме сильно вытянутого параллелограмма с отношением сторон



$s/p_{eq} \gg 1$ . Следует отметить, что образование нового нанозерна и соответствующей дисклинационной конфигурации энергетически выгодно, если мощность дисклинаций  $\omega$  находится внутри интервала  $\omega_{c1} \leq \omega \leq \omega_{c2}$ . Кривые 1 и 4 на Рис. 5 задают нижний и верхний критические уровни мощности дисклинаций:  $\omega_{c1} = 2^\circ$  и  $\omega_{c2} = 14^\circ$ , соответственно.

### 3. Влияние процесса образования новых нанозерен на трещиностойкость нанокристаллических материалов

Рассмотрим, какое влияние оказывает зарождение нового нанозерна вблизи вершины трещины на дальнейшее развитие этой трещины в нанокристаллическом материале. Трещина в твердом теле характеризуется критической длиной (длиной Гриффитса), определяемой как минимальная длина, при которой начинается катастрофический рост трещины при заданном уровне напряжений [33]. Чем больше критическая длина трещины, тем меньше вероятность ее перехода в режим катастрофического роста. Рассчитаем критическую длину  $l_c$  внутризеренной трещины I типа, которая развивается под действием суперпозиции внешней нагрузки  $\sigma_0$  и поля напряжений конфигурации дефектов (которая представляет собой дисклинационные диполи и дислокационные ряды  $AC$  и  $BD$  (Рис. 1)). Для расчета воспользуемся силовым критерием (например, [33]):

$$K_I(l = l_c) = K_{IC}, \quad (9)$$

где  $K_I$  – коэффициент интенсивности напряжений, рассчитываемый по формуле [26]:

$$K_I(l) = \sqrt{\frac{2}{\pi l}} \int_0^l \sigma_{yy}(x, y=0) \sqrt{\frac{x}{l-x}} dx. \quad (10)$$

Здесь  $\sigma_{yy}$  – компонента тензора напряжений, создаваемых внешней нагрузкой и дефектной конфигурацией в отсутствие трещины, а  $K_{IC}$  – критическое значение коэффициента интенсивности напряжений. Для случая трещины нормального отрыва в изотропной среде имеем:

$$K_{IC} = \sqrt{\frac{4\gamma G}{1-\nu}}, \quad (11)$$

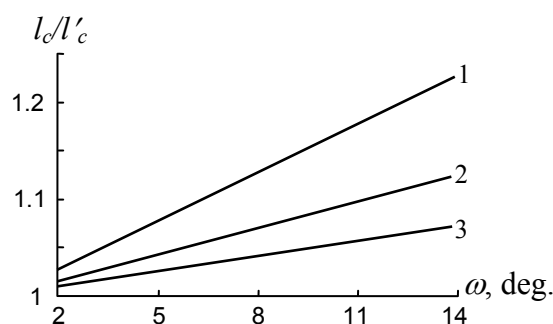
где  $\gamma$  – удельная энергия (на единицу площади) свободной поверхности трещины. Напряжение  $\sigma_{yy}$ , входящее в формулу (10), представимо в виде  $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}^d + \sigma_0$ , где  $\sigma_{yy}^d$  – компонента тензора напряжений, создаваемых дисклинационными диполями и дислокационными рядами  $AC$  и  $BD$  (Рис. 1). Выражение для компоненты  $\sigma_{yy}^d$  может быть получено из формул [27].

Формулы (9)-(11) позволяют численно рассчитать критическую длину  $l_c$  трещины, которая развивается в совместном поле внешнего растягивающего напряжения  $\sigma_0$  и напряжений, создаваемых конфигурацией дефектов. В частном случае  $\omega = 0$  (когда отсутствуют дисклинационные диполи и дислокационные ряды

(Рис. 1)) и  $\sigma_{yy}(x, y) = \sigma_0$ , из формул (9)–(11), мы получаем известное выражение для критической длины  $l'_c = l_c(\omega = 0)$  трещины нормального отрыва, раскрывающейся только под действием внешней растягивающей нагрузки:

$$l'_c = \frac{8G\gamma}{\pi(1-\nu)\sigma_0^2}. \quad (12)$$

Отношение  $l_c/l'_c$  численно описывает влияние зарождения нового нанозерна (Рис.1) на рост трещины. Формирование нового нанозерна повышает трещиностойкость материала, если отношение  $l_c/l'_c > 1$  и снижает трещиностойкость, если отношение  $l_c/l'_c < 1$ . Построим зависимость  $l_c/l'_c$  от мощности  $\omega$  дисклинаций, составляющих диполи (Рис. 1), которая варьируется в интервале  $\omega_{c1} \leq \omega \leq \omega_{c2}$  (интервал, задающий мощности, при которых зарождение нанозерен энергетически выгодно), для различных значений размера  $s$  нанозерна.



**Рис. 6.** Зависимости отношения  $l_c/l'_c$  критических длин трещины от мощности  $\omega$  дисклинаций, составляющих дипольные конфигурации, при различных значениях размера нанозерна  $s = 10, 20$  и  $30$  nm (кривые 1, 2 и 3 соответственно).

Расчет проведем на примере нанокристаллической керамики  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ , используя значения параметров, приведенных в предыдущем разделе. Из зависимостей  $l_c/l'_c(\omega)$ , приведенных на Рис. 6, видно, что критическая длина трещины растет или, другими словами, трещиностойкость нанокристаллической керамики  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  повышается с увеличением мощности  $\omega$  дисклинаций и/или уменьшением размера  $s$  нанозерна.

#### 4. Заключение

Таким образом, стимулируемое механическим напряжением зарождение новых нанозерен и связанных с ними дисклинационных конфигураций вблизи вершин трещин (Рис. 1 и 2) является энергетически выгодным процессом в нанокристаллических материалах в широких интервалах параметров их структуры. Зарождение новых нанозерен включает расщепление границ зерен (Рис. 1). Следовательно, вероятность протекания таких процессов при росте трещины велика именно в нанокристаллических материалах, в которых плотность ансамбля границ зерен чрезвычайно высока. Рассматриваемый процесс приводит к частичной релаксации высоких локальных напряжений вблизи вершин трещин, что обуславливает повышение трещиностойкости нанокристаллических материалов. Как следствие, зарождение новых нанозерен вблизи

вершин трещин представляет собой особый (в частности, специфический для нанокристаллических структур) микромеханизм повышения трещиностойкости нанокристаллических материалов. Отметим, что в нанокристаллических керамиках зарождение новых нанозерен, вызванное действием механических напряжений, осуществляется более эффективно, чем стимулируемый напряжением рост зерен, поскольку миграция ранее образовавшихся границ зерен в нанокерамиках часто затруднена (вследствие различия химического состава внутри зерен и в границах зерен [29]).

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0353 и грант МК-5600.2011.1) и Программы Президиума РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов”.*

### Литература

- [1] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *MRS Bullet.* **29** (2004) 22.
- [2] I.A. Ovid'ko // *Int. Mater. Rev.* **50** (2005) 65.
- [3] Р.В. Гольдштейн, Н.Ф. Морозов // *Физ. Мезомеханика* **10** (2007) 17.
- [4] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [5] R.A. Andrieviski // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **22** (2009) 1.
- [6] H.A. Padilla II, B.K. Boyce // *Exp. Mech.* **50** (2010) 5.
- [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.R. Rice, R.M. Thompson // *Phil. Mag.* **29** (1974) 73.
- [9] J.R. Rice // *J. Mech. Phys. Sol.* **40** (1992) 239.
- [10] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Scr. Mater.* **60** (2009) 627.
- [11] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **58** (2010) 5286.
- [12] S. Bhaduri, S.B. Bhaduri // *Nanostruct. Mater.* **8** (1997) 755.
- [13] Y. Zhao, J. Qian, L.L. Daemen, C. Pantea, J. Zhang, G.A. Voronin, T.W. Zerda // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 1356.
- [14] A.A. Kaminskii, M.Sh. Akchurin, R.V. Gainutdinov, K. Takaichi, A. Shirakava, H. Yagi, T. Yanagitani, K. Ueda // *Crystallography Reports* **50** (2005) 869.
- [15] Y.T. Pei, D. Galvan, J.T.M. De Hosson // *Acta Mater.* **53** (2005) 4505.
- [16] A. Mukhopadhyay, B. Basu // *Int. Mater. Rev.* **52** (2007) 257.
- [17] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Mater.* **56** (2008) 2718.
- [18] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман, Е.С. Аифантис // *Физ. Мех. Матер.* **8** (2009) 155.
- [19] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *J. Mech. Phys. Solids* **58** (2010) 1088.
- [20] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Int. J. Plasticity* **26** (2010) 1629.
- [21] W. Yang, H.T. Wang // *Int. J. Sol. Struct.* **45** (2008) 3897.
- [22] F. Yang, W. Yang // *J. Mech. Phys. Solids* **57** (2009) 305.
- [23] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba, A.K. Mukherjee // *Scripta Mater.* **62** (2010) 387.
- [24] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **92** (2008) 081914.
- [25] С.В. Бобылев, И.А. Овидько // *Физ. Мех. Матер.* **8** (2009) 65.
- [26] М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 251916.
- [27] В.И. Владимиров, А.Е. Романов, *Дисклинации в кристаллах* (Л., Наука, 1986).
- [28] М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Phil. Mag.* **88** (2008) 1137.
- [29] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, *Interfaces in crystalline materials* (Clarendon Press, Oxford, 1995).

- [30] R.G. Munro // *J. Am. Ceram. Soc.* **80** (1997) 1919.
- [31] M. Legros, D.S. Gianola, K.J. Hemker // *Acta Mater.* **56** (2008) 3380.
- [32] T. Watanabe, H. Yoshida, T. Saito, T. Yamamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma // *Mater. Sci. Forum* **304-306** (1999) 601.
- [33] *Механика разрушения и прочность материалов*, под ред. В.В. Панасюка (Наукова думка, Киев, 1988).

## GENERATION OF NEW NANOSCOPIC GRAINS NEAR CRACK TIPS IN DEFORMED NANOCRYSTALLINE MATERIALS

I.A. Ovid'ko<sup>1,2</sup>, N.V. Skiba<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,  
Bolshoj 61, Vasilievskii Ostrov, St. Petersburg 199178, Russia*

<sup>2</sup>*Department of Mathematics and Mechanics, St. Petersburg State University,  
Universitetsky pr. 28, Stary Peterhof, St. Petersburg 198504, Russia  
email: ovidko@gmail.com*

**Abstract.** A theoretical model is suggested which describes the nucleation of new nanoscopic grains (nanograins) near crack tips in nanocrystalline metals and ceramics under mechanical load. In the framework of the model, nanoscopic grain boundaries split and migrate under high shear stresses near crack tips. Migration of mobile grain boundaries with disclination dipoles results in nucleation of nanograins (modeled as parallelograms in 2-dimensional nanocrystalline structures) near crack tips. This process of nanograin nucleation represents a special mode of the rotational plastic deformation and causes a partial high local stress relaxation near crack tips. The latter contributes to enhancement of the fracture toughness of nanocrystalline ceramics and metals.

### References

- [1] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *MRS Bullet.* **29** (2004) 22.
- [2] I.A. Ovid'ko // *Int. Mater. Rev.* **50** (2005) 65.
- [3] R.V. Gol'dshtein, N.F. Morozov // *Phys. Mesomechanics* **10** (2007) 17.
- [4] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [5] R.A. Andrievski // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **22** (2009) 1.
- [6] H.A. Padilla II, B.K. Boyce // *Exp. Mech.* **50** (2010) 5.
- [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.R. Rice, R.M. Thompson // *Phil. Mag.* **29** (1974) 73.
- [9] J.R. Rice // *J. Mech. Phys. Sol.* **40** (1992) 239.
- [10] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Scr. Mater.* **60** (2009) 627.
- [11] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **58** (2010) 5286.
- [12] S. Bhaduri, S.B. Bhaduri // *Nanostruct. Mater.* **8** (1997) 755.
- [13] Y. Zhao, J. Qian, L.L. Daemen, C. Pantea, J. Zhang, G.A. Voronin, T.W. Zerda // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 1356.
- [14] A.A. Kaminskii, M.Sh. Akchurin, R.V. Gainutdinov, K. Takaichi, A. Shirakava, H. Yagi, T. Yanagitani, K. Ueda // *Crystallography Reports* **50** (2005) 869.

- [15] Y.T. Pei, D. Galvan, J.T.M. De Hosson // *Acta Mater.* **53** (2005) 4505.
- [16] A. Mukhopadhyay, B. Basu // *Int. Mater. Rev.* **52** (2007) 257.
- [17] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Mater.* **56** (2008) 2718.
- [18] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Phys. Mech. Mater.* **8** (2009) 155.
- [19] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *J. Mech. Phys. Solids* **58** (2010) 1088.
- [20] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Int. J. Plasticity* **26** (2010) 1629.
- [21] W. Yang, H.T. Wang // *Int. J. Sol. Struct.* **45** (2008) 3897.
- [22] F. Yang, W. Yang // *J. Mech. Phys. Solids* **57** (2009) 305.
- [23] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba, A.K. Mukherjee // *Scripta Mater.* **62** (2010) 387.
- [24] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **92** (2008) 081914.
- [25] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Phys. Mech. Mater.* **8** (2009) 65.
- [26] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 251916.
- [27] V.I. Vladimirov, A.E. Romanov, *Disclinations in crystals* (Nauka, Leningrad, 1986).
- [28] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Philos. Mag.* **88** (2008) 1137.
- [29] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, *Interfaces in crystalline materials* (Clarendon Press, Oxford, 1995).
- [30] R.G. Munro // *J. Am. Ceram. Soc.* **80** (1997) 1919.
- [31] M. Legros, D.S. Gianola, K.J. Hemker // *Acta Mater.* **56** (2008) 3380.
- [32] T. Watanabe, H. Yoshida, T. Saito, T. Yamamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma // *Mater. Sci. Forum* **304-306** (1999) 601.
- [33] *Fracture mechanics and strength of materials*, eds. by V.V. Panasuk (Naukova dumka, Kiev, 1988).