

ЗАРОЖДЕНИЕ ТРЕЩИН В НАНОМАТЕРИАЛАХ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ И КВАЗИСТАТИЧЕСКОМ РЕЖИМАХ ДЕФОРМИРОВАНИЯ

И.А. Овидько^{1,2}

¹Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург 199178, Россия

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

email: ovidko@nano.ipme.ru

Аннотация. Представлен обзор экспериментальных данных, компьютерных и теоретических моделей процессов зарождения трещин в нанокристаллических материалах при высокоскоростном и квазистатическом режимах деформирования. В частности, приведены основные экспериментальные факты и результаты компьютерного моделирования в данной области. Особое внимание уделяется изложению теоретических моделей, описывающих процессы зарождения наноскопических трещин вблизи вершин микротрещин и нановключений второй фазы в нанокристаллических материалах при высокоскоростном и квазистатическом режимах деформирования.

1. Введение

Нанокристаллические материалы представляют собой твердые тела, состоящие из зерен (кристаллитов) с линейными размерами менее 100 нм (рис.1). Нанокристаллические металлические и керамические материалы характеризуются уникальными механическими свойствами, которые чрезвычайно интересны для широкого круга высоких технологий (например, [1–6]). В частности, нанокристаллические металлы и керамики обычно характеризуются очень высокими показателями прочности и твердости, которые в 2-10 раз превосходят соответствующие характеристики обычных крупнозернистых поликристаллов того же химического состава. Вместе с тем, в большинстве случаев нанокристаллические материалы имеют низкую пластичность и трещиностойкость, что существенно снижает их технологическую значимость. Однако, в последние годы несколькими исследовательскими группами были получены нанокристаллические металлические и керамические материалы, которые одновременно обладают сверхвысокой прочностью и функциональной пластичностью (которая характеризуется степенью пластической деформации до разрушения $\varepsilon_f \sim 0.1$ или более) или даже сверхпластичностью, достижимой при относительно низких температурах и высоких скоростях деформации [7-16]. Природа сочетания сверхпрочности и высокой пластичности некоторых «особенных» нанокристаллических материалов не выявлена и является предметом интенсивных дискуссий.

Одним из критических процессов, контролирующих прочность и пластичность нанокристаллических материалов является зарождение трещин в таких материалах при механическом нагружении. Поэтому, для понимания природы уникальных механических свойств нанокристаллических металлических материалов, чрезвычайно

важным представляется адекватное описание процессов разрушения нанокристаллических материалов и выявление механизмов подавления зарождения трещин в таких материалах с учетом их структурных особенностей. В настоящей работе представлен обзор литературы, посвященной исследованиям процессов зарождения трещин в нанокристаллических материалах при высокоскоростном и квазистатическом режимах деформирования.

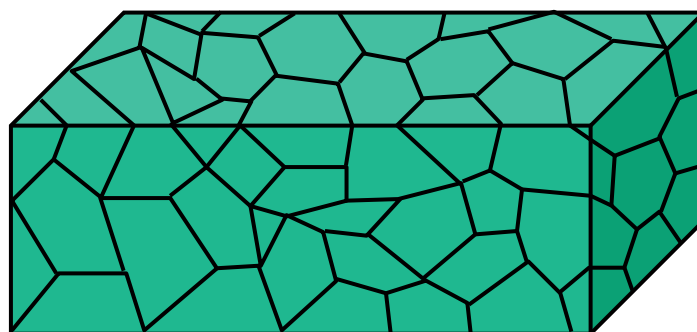


Рис. 1. (Color online) Нанокристаллическое твердое тело характеризуется высокой плотностью границ зерен и их тройных стыков, а также наноскопическими размерами зерен (≤ 100 нм).

2. Теория и компьютерное моделирование поведения нанокристаллических материалов при высокоскоростном и квазистатическом режимах деформирования (методологические аспекты)

В последнее десятилетие был достигнут существенный прогресс в экспериментальном изучении структуры и ее эволюции при деформировании нанокристаллических материалов. Однако, нередко встречаются ситуации, в которых из-за высоких требований к точности измерений на атомном и наноскопическом уровнях современные экспериментальные методы не позволяют однозначно определить особенности нанокристаллической структуры и действующие механизмы деформации и разрушения. В таких ситуациях для понимания фундаментальной природы уникальных механических свойств нанокристаллических материалов очень важны аналитические теоретические модели и компьютерное моделирование эволюции структуры, пластической деформации и процессов разрушения в этих материалах.

В основе аналитических теоретических моделей структуры и механических свойств нанокристаллических материалов лежат как традиционные методы анализа, которые используются в теории механических свойств обычных крупнозернистых поликристаллов и композитов, так и новые теоретические концепции, которые учитывают особенности наноструктуры и их влияние на процессы деформирования и разрушения в нанокристаллических материалах. В частности, при описании поведения нанокристаллических твердых тел при механическом нагружении эффективно используется теория наномасштабных конфигураций дефектов. В рамках этой теории дефекты описываются как источники полей внутренних напряжений и носители пластического течения, которые определяют процессы деформирования и разрушения нанокристаллических материалов на наномасштабном уровне.

В теории дефектов нанокристаллических твердых тел обычно используются традиционные методы теории упругости. Кроме того, при анализе диффузионных процессов и в тех случаях, когда существенны ядра дефектов, применяют соответственно диффузионные уравнения и методы градиентной теории упругости. Ограниченность аналитических теоретических моделей естественным образом связана с тем, что с их помощью изучаются типичные дефектные конфигурации и процессы.

Нетипичные структуры, дефектные конфигурации и процессы обычно не принимаются во внимание, несмотря на то, что они иногда могут играть существенную роль. Кроме того, аналитические теоретические модели не всегда эффективны при одновременном описании структур и процессов на различных масштабных уровнях. Поэтому для подтверждения результатов аналитических моделей обычно требуется сравнение с экспериментальными данными и результатами атомного моделирования.

Обсудим кратко общую методологию, обоснованность и ограничения компьютерного моделирования нанокристаллических структур и их механических свойств. В последние годы были получены впечатляющие результаты по атомному моделированию механизмов деформации и разрушения, действующих в нанокристаллических материалах. Эти результаты появились благодаря резкому повышению за прошедшие десятилетия быстродействия компьютерных процессоров и развитию архитектуры параллельных вычислений. Оказалось, что наиболее эффективным методом атомного моделирования нанокристаллических твердых тел в процессе пластической деформации является метод молекулярной динамики [17, 18]. С помощью этого метода было смоделировано поведение различных нанокристаллических структур под действием механической нагрузки в режиме реального времени. В методе молекулярной динамики используются уравнения Ньютона для систем, состоящих из миллионов и миллиардов атомов, взаимодействия между которыми рассчитываются через специально подобранные потенциалы межатомного взаимодействия. Этот подход учитывает ангармонизм кристаллической решетки и очень неоднородные внутренние напряжения в деформируемых наноструктурах (подробнее см. [17, 18]). Однако, наряду с привлекательными возможностями данного подхода, у него имеются и фундаментальные недостатки, а именно чрезвычайно малые промежутки времени, в течение которых удается моделировать поведение атомной системы в режиме реального времени, и обоснованность выбранных потенциалов межатомного взаимодействия. Например, типичные значения длительности и скорости деформации при молекулярно-динамическом моделировании составляют соответственно около 10 нс (10^{-8} с) и 10^7 с $^{-1}$. Для большинства экспериментов по квазистатической пластической деформации нанокристаллических материалов с типичными скоростями деформирования в пределах от 10^{-5} с $^{-1}$ до 10^3 с $^{-1}$ эти значения нереальны. Как следствие, результаты компьютерного моделирования процессов деформации в нанокристаллических структурах напрямую применимы только для высокоскоростного деформирования. Что касается межатомных взаимодействий, то они описываются через эмпирические или полуэмпирические потенциалы взаимодействия. Их пригодность обычно проверяется при моделировании бездефектных твердых тел, когда не полностью учитываются непарный характер электронной связи между атомами и ее сложные изменения вблизи дефектов кристаллической решетки. Кроме того, большинство атомных моделей создано для моноатомных наноструктурных твердых тел. Их применение для анализа эволюции полиатомных и композитных наноструктур ограничено трудностью корректного описания потенциалов межатомного взаимодействия в случае двух или более сортов атомов.

Тем не менее, молекулярно-динамическое моделирование пластической деформации нанокристаллических материалов дает важную информацию о структурных трансформациях, происходящих в нанокристаллических твердых телах при высокоскоростном деформировании. Например, в работе [19] по молекулярно-динамическому моделированию ударного нагружения нанокристаллической меди были выявлены аномально высокие значения ее прочности в областях позади фронта ударной волны (рис. 2).

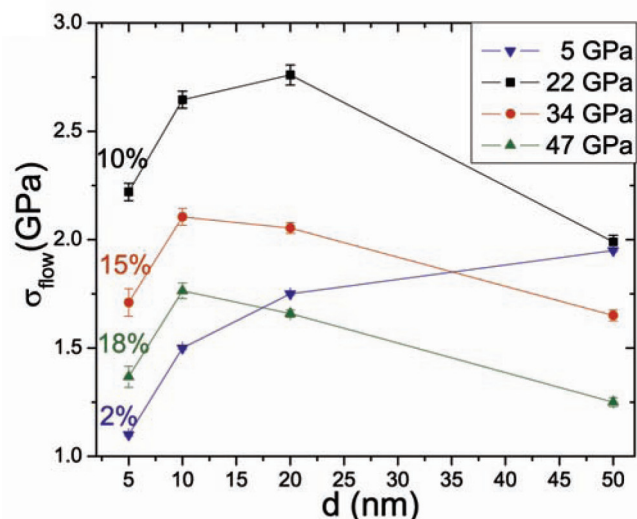


Рис. 2. (Color online) Типичные профили напряжения течения в нанокристаллической меди при прохождении ударной волны при различных величинах характеристического давления удара (в соответствии с результатами молекулярно-динамического моделирования). Напряжение течения имеет наивысшие значения для ударных волн, характеризующихся давлениями в диапазоне от 20 до 30 ГПа. Также, на рисунке представлены значения объемной деформации (в процентах). Reprinted from [19]. Copyright 2005, with permission from American Association for the Advancement of Science.

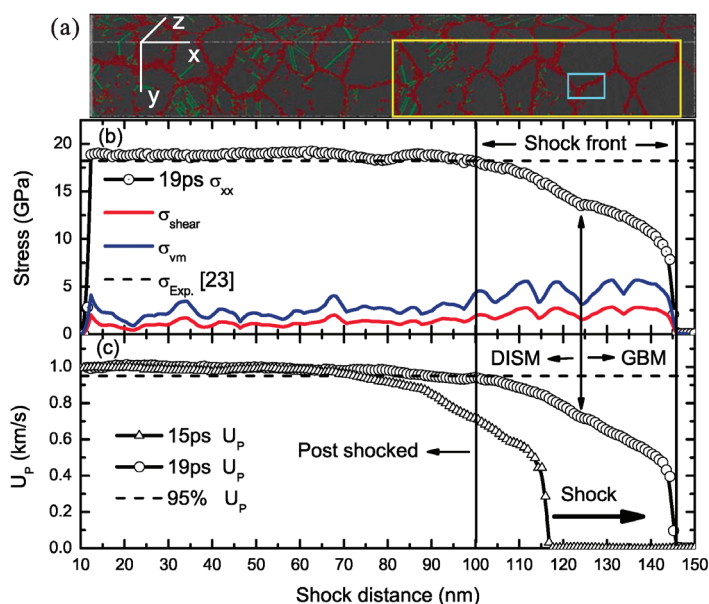


Рис. 3. (Color online) (a) Образец нанокристаллического алюминия при ударном сжатии со скоростью боя $U_p = 1$ км/с после прохождения ударной волны в течение 19 пикосекунд вдоль направления X. (b) Рассчитанные профили характеристических напряжений. (c). Профили скоростей боя и частиц вдоль распространения ударной волны в течение 15 и 19 пикосекунд. DISM и GBM – области фронта ударной волны, в которых доминирует соответственно зернограничная деформация и решеточное скольжение. Reprinted from [20]. Copyright 2010, with permission from American Institute of Physics.

Результаты [20] молекулярно-динамического моделирования поведения нанокристаллического алюминия при ударном нагружении свидетельствуют о действии мод зернограницной пластической деформации и решеточного скольжения во фронте ударной волны (рис. 3).

3. Процессы вязкого и хрупкого разрушения в нанокристаллических материалах. Экспериментальные данные

В настоящее время особенности процессов разрушения в нанокристаллических металлических материалах недостаточно хорошо идентифицированы в экспериментах, вследствие влияния большого числа факторов на указанные процессы. Тем не менее, на основе имеющихся экспериментальных данных в этой области (см., например, книгу [3]), можно выделить основные тенденции в характере разрушения нанокристаллических материалов. Так, в нанокристаллических металлах протекают процессы как вязкого, так и хрупкого разрушения, которые чувствительны к размеру зерна материала и его структурным особенностям. В частности, имеется ряд экспериментальных свидетельств вязкого разрушения нанокристаллических материалов (со средним размером зерна более 20 нм) с предшествующим формированием шейки и образованием ямок на поверхностях разрушения [7,10,21-23]. При этом вязкое разрушение осуществляется посредством механизма слияния микропор. Вместе с тем, в экспериментах [23,24] было выявлено, что с уменьшением размера зерна характер разрушения меняется от вязкого типа разрушения (для нанокристаллического Ni со средним размером зерна ~ 44 нм) к хрупкому (для нанокристаллического сплава Ni-15%Fe со средним зерном размером ~ 9 нм). В последнем случае, магистральная трещина образуется за счет множественного слияния межзеренных наноскопических и/или микроскопических трещин. При этом поверхности разрушения имеют структуру, типичную для хрупкого разрушения.

В общем случае на процессы разрушения в нанокристаллических материалах существенное влияние оказывает наличие большого количества зернограницной фазы (Рис. 1). Границы зерен служат предпочтительными местами для образования нанотрещин и их роста, вследствие низкой атомной плотности и слабых межатомных связей в таких границах по сравнению с кристаллической структурой внутренних областей зерен. В случае вязкого разрушения, реализующегося посредством слияния микропор, границы зерен с их высокой диффузионной проницаемостью, ускоряют контролируемый диффузией рост микропор. Кроме того, энергия зернограницной фазы вносит вклад в движущую силу разрушения, поскольку при росте трещин вдоль границ зерен, они по-существу исчезают. Таким образом, при росте трещин вдоль границ зерен выделяется дополнительная энергия зернограницной фазы, по сравнению с внутризеренным разрушением, которое реализуется посредством роста трещин внутри зерен. Вместе с тем, границы зерен в нанокристаллических материалах обычно имеют малые длины и искривлены на многочисленных тройных стыках. Поэтому, в ситуации, когда трещины имеют склонность к росту вдоль границ зерен, сложная геометрия таких границ оказывает тормозящее действие на процессы межзеренного разрушения.

В общем случае в нанокристаллических материалах, характеризующихся по определению высокими плотностями ансамблей границ зерен (рис. 1), существует конкуренция между внутризеренными и межзеренными процессами разрушения. В зависимости от структурных параметров материала и условий нагружения, один из этих процессов доминирует либо они протекают одновременно в механически нагружаемом нанокристаллическом твердом теле.

В экспериментах [23, 24] выявлено, что уменьшение размера зерна вызывает вязко-хрупкий переход, а именно переход от вязкого типа разрушения (для

нанокристаллического Ni со средним размером зерна ~ 44 нм) к хрупкому (для нанокристаллического сплава Ni-15%Fe со средним зерном размером ~ 9 нм). Эти экспериментальные данные свидетельствуют о выраженной тенденции эффекта размера зерна на характер разрушения нанокристаллических металлических материалов.

Вместе с тем, помимо размера зерна, другие факторы также заметно влияют на процессы разрушения в нанокристаллических металлах. В частности, образованию трещин и их росту может существенно способствовать присутствие в материале «исходных» несплошностей (трещин, пор), т.е. несплошностей, образовавшихся в процессе получения нанокристаллического образца. Такое влияние «исходных» несплошностей было выявлено в экспериментах [25], в которых исследовались процессы разрушения нанокристаллических пленок Ni, полученных двумя разными методами, а именно методом магнетронного напыления и методом пульсирующего лазерного осаждения. По данным [25], нанокристаллические пленки Ni, полученные методом магнетронного напыления, характеризуются узким распределением зерен по размерам (при среднем размере ~ 19 нм), содержат исходные поры и разрушаются хрупким образом посредством быстрого слияния межзеренных трещин. Параллельно исследовались нанокристаллические пленки Ni, полученные методом пульсирующего лазерного осаждения. Экспериментально выявлено [25], что такие пленки характеризуются узким распределением зерен по размерам (при среднем размере ~ 17 нм), не содержат исходных пор (или других несплошностей) и обладают функциональной пластичностью.

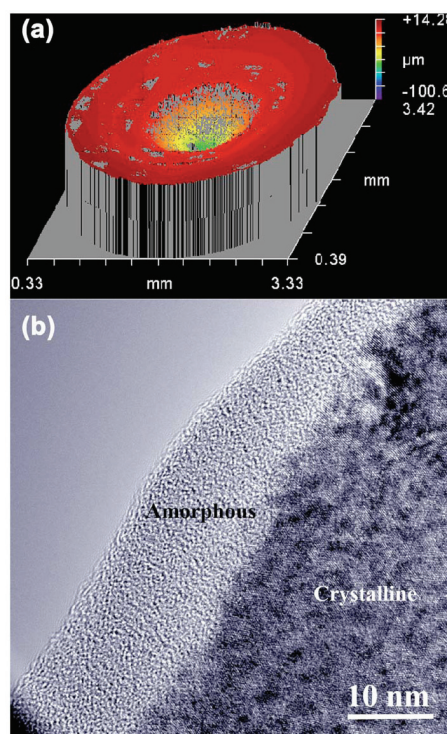


Рис. 4. (Color online) (a) Профиль поверхности нанокристаллического никеля после ударного нагружения. (b) Изображение (полученное методом электронной микроскопии высокого разрешения) приповерхностного аморфного слоя нанокристаллического никеля после ударного нагружения. Детальное обсуждение эксперимента приведено в статье [26]. Reprinted from [26]. Copyright 2010, with permission from American Institute of Physics.

В работе [26] приведены результаты экспериментов по высокоскоростному деформированию нанокристаллического Ni. Величина скорости деформации при сжатии под действием лазерного удара составляла более 10^7 с^{-1} , а напряжения достигали величин 20-70 ГПа в течение наносекунд. Исходные образцы нанокристаллического Ni имели средний размер зерен в диапазоне от 30 до 100 нм. Лазерный удар произвел воронку с приповерхностной аморфной фазой и высокоскоростную пластическую деформацию окружающего нанокристаллического материала (рис. 4). Согласно [26], основными микроструктурными особенностями образцов нанокристаллического Ni после такого деформирования являются сохранение исходного нанокристаллического состояния (с теми же типичными величинами среднего размера зерен) и высокая плотность решеточных дислокаций. Иными словами, доминирующим микромеханизмом деформации в нанокристаллическом Ni при ударном нагружении служит массовое зарождение решеточных дислокаций и их перемещения на наноскопические расстояния (поскольку перемещениям на значимые расстояния препятствуют границы зерен). В данных условиях эффективным является гомогенное зарождение решеточных дислокаций и их групп по механизму нановозмущений [27-29] под действием сверхвысоких напряжений.

4. Зарождение нанотрещин на тройных стыках границ зерен в нанокристаллических материалах

Данные экспериментальных исследований микроструктуры механически нагружаемых нанокристаллических материалов приобретают чрезвычайно высокую значимость для понимания характерных закономерностей и выявления типичных микромеханизмов их разрушения. Согласно результатам экспериментальных исследований [21,22], в процессе пластической деформации в функционально пластичном нанокристаллическом Ni (со средним размером зерен ~30-40 нм) нанопоры и нанотрешины (представляющие собой соответственно поры и трещины с размерами порядка 1-10 нм) обычно образуются на границах зерен и их тройных стыках вблизи вершин микротрещин (рис 5). Результаты моделирования методом молекулярной динамики [30] свидетельствуют об образовании нанотрещин в тройных стыках границ зерен вблизи вершин исходно существующих (заданных начальными условиями компьютерного эксперимента) микротрещин в нанокристаллических образцах Ni с размерами зерен от 5 до 12 нм. Обсуждаемые экспериментальные данные [21,22] и результаты компьютерного моделирования [30] свидетельствуют об особой роли тройных стыков как мест предпочтительного зарождения нанотрещин в нанокристаллических материалах. Более того, в нанокристаллических материалах с очень большой объемной долей тройных стыков границ зерен, нанотрешины в таких стыках могут быть типичными (а, возможно, и основными) элементарными носителями разрушения. В данном контексте значимый интерес представляет механизм зарождения нанотрещин в тройных стыках. В работах [31-33] предложены теоретические модели, которые описывают зарождение и рост нанотрещин в тройных стыках границ зерен как процессы, инициируемые межзеренным скольжением в деформируемых нанокристаллических металлах. Ниже мы кратко рассмотрим основные положения и результаты модели [33], предлагающей эффективное описание зарождения нанотрещин в тройных стыках границ зерен вблизи вершин микротрещин.

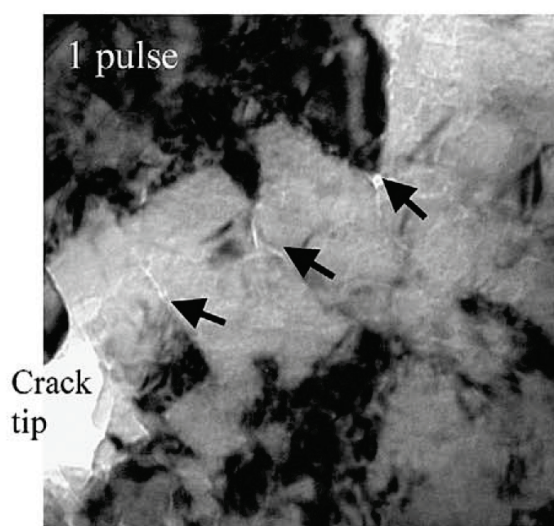


Рис. 5. Изображение (полученное методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения) области вблизи вершины трещины в деформируемом нанокристаллическом никеле. В данной области образуются наноскопические трещины (несплошности, обозначенные стрелками). Они локализуются в тройных стыках границ зерен. Детальное обсуждение эксперимента приведено в статьях [22,23]. Reprinted from [22]. Copyright 2003, with permission from Elsevier.

Рассмотрим нанокристаллическое твердое тело (состоящее из нанозерен и разделяющих их границ зерен; см. рис. 6а), которое содержит длинную затупленную трещину. Предполагается, что нанокристаллическое твердое тело находится под действием одноосной растягивающей нагрузки σ_0 . Сечение типичного фрагмента нанокристаллического твердого тела схематически изображено на рис. 6а. Пусть трещина пересекает границы зерен на расстоянии r_0 от ближайшего тройного стыка (рис. 6).

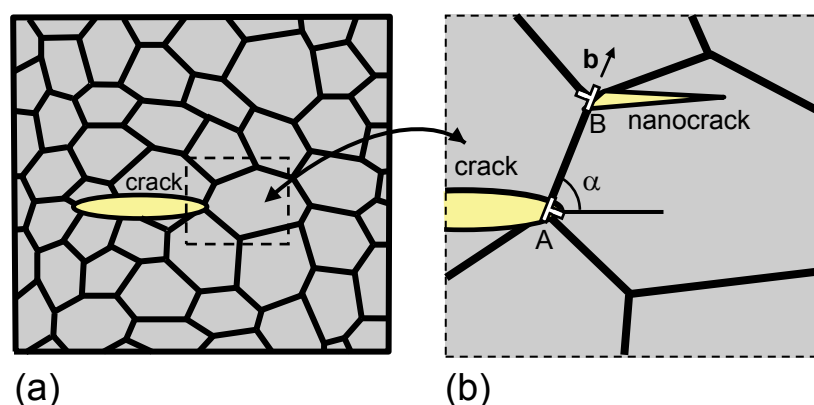


Рис. 6. (Color online) Эллиптическая трещина в деформируемом нанокристаллическом материале. (а) Общий вид. (б) Выноска показывает образование краевой дислокации и нанотрещины в тройном стыке В в результате зернограницного проскальзывания по границе АВ возле вершины длинной трещины.

Напряжения, действующие у вершины трещины в деформируемом теле, вызывают зернограничное проскальзывание вдоль границы зерен АВ (рис. 6b) и других границы зерен вблизи вершины трещины. При этом тройной стык В препятствует зернограничному проскальзыванию вдоль границы зерен АВ (рис. 6b), в результате чего зернограничное проскальзывание вызывает незавершенный пластический сдвиг возле тройного стыка В. С точки зрения теории дефектов в твердых телах этот тройной стык содержит дислокацию, величина вектора Бюргерса которой увеличивается в процессе зернограничного проскальзывания [34].

Если величина b вектора Бюргерса дислокации достаточно велика, в поле напряжений дислокации может образоваться нанотрещина. (рис. 6b). Предыдущие оценки [34] показали, что в случае плоской незатупленной трещины напряжения вблизи вершины трещины слишком малы, чтобы вызвать образование дислокации с достаточно большим для образования нанотрещины вектором Бюргерса. Это связано с тем, что рост незатупленной трещины может происходить при относительно низком уровне напряжений, который недостаточен для образования дислокации с большим вектором Бюргерса. Вместе с тем ситуация может измениться, если трещина затуплена в результате предшествующего испускания решеточных дислокаций из вершины трещины или зернограничного проскальзывания в этой вершине. Напряжения, необходимые для роста затупленной трещины, значительно больше, чем для острой, и поэтому локальные напряжения возле вершины затупленной трещины могут быть значительно выше, чем напряжения вблизи острой трещины той же длины. Поэтому в дальнейшем мы проанализируем формирование нанотрещины на дислокации, образованной в результате зернограничного проскальзывания в тройном стыке границ зерен возле вершины затупленной трещины (рис. 7).

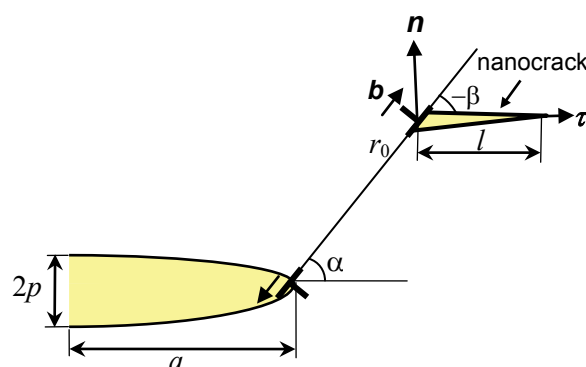


Рис. 7. (Color online) Геометрия нанотрещины, образующейся на дислокации вблизи вершины длинной эллиптической трещины.

Следуя [35, 36], будем моделировать затупленную трещину как удлинённый эллипс с радиусом кривизны ρ вершины трещины, который гораздо меньше большей полуоси эллипса a (рис. 7). (Радиус кривизны ρ связан с полуосями эллипса a и p соотношением $\rho = p^2 / a$.) Будем моделировать нанокристаллический материал с внутренней трещиной (рис. 6) как упругоизотропную среду с модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν .

Рассмотрим теперь зернограничное проскальзывание возле вершины затупленной трещины, приводящее к образованию дислокации с вектором Бюргерса b в тройном стыке. Пусть граница зерен, вдоль которой происходит проскальзывание, образует угол α с плоскостью трещины (рис. 7). В рассматриваемом случае, когда эллиптическая

трещина имеет конечную длину, зернограничное проскальзывание вдоль границы зерен АВ создает две дислокации, образующих дислокационный диполь (рис. 6b). Этот диполь состоит из дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} , расположенной в тройном стыке границ зерен, и дислокации с вектором Бюргерса $-\mathbf{b}$, образующейся внутри трещины (рис. 7). (Вторая дислокация, по-сути, имеет эллиптическую трещину в качестве своего ядра.) В равновесном состоянии величина b вектора Бюргерса дислокационного диполя соответствует минимуму энергии ΔW , связанной с образованием диполя. Иными словами, равновесное значение b_c величины вектора Бюргерса определяется соотношением $\partial(\Delta W) / \partial b|_{b=b_c} = 0$.

В рассматриваемом случае энергия ΔW представима в виде

$$\Delta W = W_s + W_c - A, \quad (1)$$

где W_s – собственная упругая энергия дислокационного диполя, W_c – энергия ядра дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} , а A – работа сдвигового напряжения, создаваемого внешней нагрузкой, по образованию дислокационного диполя.

Собственная упругая энергия дислокационного диполя задается следующим выражением [37]:

$$W_s = -\frac{b}{2} \int_0^{r_0-r_c} \sigma_{r\theta}^{dip}(r, \theta = \alpha) dr, \quad (2)$$

где $r_c \approx b$ – радиус ядра дислокации, а $\sigma_{r\theta}^{dip}$ – компонента тензора напряжений (в цилиндрической системе координат (r, θ) с началом $(0, 0)$ в вершине трещины), создаваемых диполем дислокаций в твердом теле с эллиптической трещиной (рис. 7). Второе слагаемое W_c определяется соотношением [38] $W_c \approx Db^2/2$, где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$. Наконец, последнее слагаемое в формуле (1) рассчитывается по формуле [39]:

$$A = b \int_0^{r_0} \sigma_{r\theta}^e(r, \theta = \alpha) dr, \quad (3)$$

где $\sigma_{r\theta}^e$ – компонента тензора напряжений, создаваемых внешней механической нагрузкой σ_0 вблизи вершины эллиптической трещины.

Равновесное (максимальное) значение b_c модуля вектора Бюргерса b рассчитывается с помощью формул (1)–(3) и условия $\partial(\Delta W) / \partial b|_{b=b_c} = 0$. В результате получаем:

$$b_c = (\sigma_0 / D) f(r_0, \rho, \alpha), \text{ где}$$

$$f(r_0, \rho, \alpha) = \frac{\int_0^{r_0} \tilde{\sigma}_{r\theta}^e(r, \theta = \alpha) dr}{1 - \int_0^{r_0-r_c} \tilde{\sigma}_{r\theta}^{dip}(r, \theta = \alpha) dr}. \quad (4)$$

Подинтегральные функции (которые не зависят от σ_0 и b) в формуле (4) связаны с напряжениями $\sigma_{r\theta}^{dip}$ и $\sigma_{r\theta}^e$ следующими соотношениями: $\sigma_{r\theta}^{dip} = Db \tilde{\sigma}_{r\theta}^{dip}$ и $\sigma_{r\theta}^e = \sigma_0 \tilde{\sigma}_{r\theta}^e$.

Теперь проведем расчет внешнего напряжения σ_0 , которое необходимо для зарождения диполя дислокаций (Рис. 7) с модулем вектора Бюргерса b_c . Для этого, следуя [40], положим, что эллиптическая трещина растет, если суммарное растягивающее напряжение в окрестности вершины трещины достигает критического значения σ_p , т.е. $\sigma_{yy} = \sigma_p$. Данное равенство ($\sigma_{yy} = \sigma_p$) справедливо, когда внешнее напряжение σ_0 достигает своего максимального значения σ_{0c} . Также, исследуемое равенство является верным, если радиус вершины трещины ρ превосходит некоторую критическую величину ρ_c . Согласно [41], критический радиус задается как $\rho_c = 16G\gamma / [\pi(1-\nu)\sigma_p^2]$ (где γ - удельная энергия свободной поверхности) и в случае Al примерно равен 1.4 нм.

Напряжение σ_{yy} в вершине трещины представляет собой сумму напряжения σ_{yy}^e , которое задается внешней нагрузкой, и напряжения σ_{yy}^{dip} , которое создано дислокационным диполем: $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}^e + \sigma_{yy}^{dip}$. Для напряжения σ_{yy}^e известно следующее выражение [40]:

$$\sigma_{yy}^e(x=a, y=0) = 2\sigma_0 \sqrt{a/\rho}. \quad (5)$$

Подстановка выражения (5) и соотношения $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}^e + \sigma_{yy}^{dip}$ в формулу $\sigma_{yy} = \sigma_p |_{\sigma_0=\sigma_{0c}}$ дает следующее выражение для максимального значения σ_{0c} внешнего напряжения:

$$\sigma_{0c} = \frac{\sigma_p - Dbg(r_0, \alpha, \rho)}{2} \sqrt{\frac{\rho}{a}}, \quad (6)$$

где функция $g(r_0, \alpha, \rho)$ задается соотношением $\sigma_{yy}^{dip} = Db \tilde{\sigma}_{yy}^{dip} = Dbg(r_0, \rho, \alpha)$.

В ситуации, когда $b = b_c$ и $\sigma_0 = \sigma_{0c}$, после подстановки выражения $b_c = (\sigma_0 / D) f(r_0, \rho, \alpha)$ в формулу (6) и решения результирующего уравнения для σ_{0c} , получаем:

$$\sigma_{0c} = \frac{\sigma_p}{2\sqrt{a/\rho} + f(r_0, \alpha, \rho)g(r_0, \alpha, \rho)}, \quad (7)$$

$$b_c = \frac{\sigma_p}{D} \frac{f(r_0, \alpha, \rho)}{2\sqrt{a/\rho} + f(r_0, \alpha, \rho)g(r_0, \alpha, \rho)}.$$

Функции $f(r_0, \rho, \alpha)$ и $g(r_0, \rho, \alpha)$ зависят от напряжений $\sigma_{r\theta}^e$, $\sigma_{r\theta}^{dip}$ и σ_{yy}^{dip} , создаваемых внешней нагрузкой σ_0 и дислокационным диполем в бесконечной упругой среде с эллиптической трещиной. Следуя [33], найдем выражения для этих напряжений. Напряжение $\sigma_{r\theta}^e$, создаваемое внешней нагрузкой σ_0 в бесконечной

упругой среде с эллиптической трещиной задается следующим образом [41]:

$$\sigma_{r\theta}^e = \text{Im}[(\bar{z}\varphi_e''(z) + \psi_e'(z))e^{2i\theta}] \quad (8)$$

В выражении (8) φ_e и ψ_e - есть комплексные потенциалы, определяемые следующими формулами [39]:

$$\varphi_e = \frac{\sigma_0 R}{4} \left(\xi - (2+m) \frac{1}{\xi} \right), \quad \psi_e = \frac{\sigma_0 R}{2} \left(\xi - \frac{1}{\xi} - \frac{(1+m)(1+m\xi^2)}{\xi(\xi^2-m)} \right), \quad (9)$$

$z = x + iy = a + r e^{i\theta}$, $i = \sqrt{-1}$, черта над символом означает комплексное сопряжение, $R = \sqrt{a}(\sqrt{a} + \sqrt{\rho})/2$, $m = (\sqrt{a} - \sqrt{\rho})/(\sqrt{a} + \sqrt{\rho})$, и ξ один из двух корней уравнения $z = R(\xi + m/\xi)$, при условии, что $|\xi| \geq 1$.

Поле напряжений $\sigma_{ij}^{dip}(r, \theta)$, создаваемое дислокационным диполем в бесконечной упругой среде с эллиптической трещиной (рис. 6 и 7) рассчитывается из соотношения $\sigma_{ij}^{dip}(r, \theta) = \sigma_{ij}^d(r_0, \alpha, r, \theta) - \sigma_{ij}^d(0, \alpha, r, \theta)$, где $\sigma_{ij}^d(r_0, \alpha, r, \theta)$ - поле напряжений, создаваемое дислокацией, которая расположена в точке В (рис. 6b), а $\sigma_{r\theta}^d(0, \alpha, r, \theta)$ - поле напряжений, создаваемое дислокацией, ядро которой “размазано” внутри эллиптической трещины (рис. 6b).

Напряжение $\sigma_{r\theta}^d(r_0, \alpha, r, \theta)$ рассчитывается из соотношения [39]:

$$\sigma_{r\theta}^d(r_0, \alpha, r, \theta) = \text{Im}[(\bar{z}\varphi_d''(z) + \psi_d'(z))e^{2i\theta}], \quad (10)$$

где

$$\varphi_d(z) = A \ln \xi - z_d + \varphi_{im}(z), \quad \psi_d(z) = \bar{A} \ln \xi - z_d - A \frac{\bar{z}_d}{z - z_d} + \psi_{im}(z), \quad (11)$$

$$\varphi_{im}(z) = 2A \ln \xi - A \ln \left(\xi - \frac{m}{\xi_d} \right) - A \ln \left(\xi - \frac{1}{\xi_d} \right) + \bar{A} \frac{\xi_d(1+m\xi_d^2) - \bar{\xi}_d(\xi_d^2+m)}{\xi_d \bar{\xi}_d (\xi_d^2-m)(\xi-1/\bar{\xi}_d)}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \psi_{im}(z) = & 2\bar{A} \ln \xi - \bar{A} \ln \left(\xi - \frac{m}{\xi_d} \right) - \bar{A} \ln \left(\xi - \frac{1}{\xi_d} \right) \\ & + A \frac{\bar{\xi}_d(\xi_d^2+m^3) - m\xi_d(\bar{\xi}_d^2+m)}{\xi_d \bar{\xi}_d (\xi_d^2-m)(\xi-m/\xi_d)} - \xi \frac{1+m\xi^2}{\xi^2-m} \frac{d\varphi_{im}}{d\xi}, \end{aligned} \quad (13)$$

ξ_d - один из корней уравнения $z_d = R(\xi_d + m/\xi_d)$ при условии, что $|\xi_d| \geq 1$, $z = a + r e^{i\theta}$, $z_d = a + r_0 e^{i\alpha}$, а $A = Gbe^{i\theta}/[4\pi i(1-\nu)]$.

По аналогии с формулой (10), ниже запишем выражения для компонент тензора напряжений σ_{yy}^d , σ_{mm}^d и $\sigma_{\tau n}^d$:

$$\sigma_{yy}^d(r_0, \alpha, r, \theta) = \text{Im}[2\varphi_d'(z) + \bar{z}\varphi_d''(z) + \psi_d'(z)], \quad (14)$$

$$\sigma_{nn}^d(r_0, \alpha, r, \theta) = \text{Im}[(2\varphi_d'(z) + \bar{z}\varphi_d''(z) + \psi_d'(z))e^{2i(\alpha+\beta)}], \quad (15)$$

$$\sigma_{\tau n}^d(r_0, \alpha, r, \theta) = \text{Im}[(\bar{z}\varphi_d''(z) + \psi_d'(z))e^{2i(\alpha+\beta)}]. \quad (16)$$

Напряжения σ_{nn}^e и $\sigma_{\tau n}^e$ задаются формулами (15) и (16), в которых индексы 'd' заменены индексами 'e'.

В итоге, выражения для напряжений $\sigma_{r\theta}^{dip}$, σ_{yy}^{dip} , σ_{nn}^{dip} и $\sigma_{\tau n}^{dip}$ могут быть получены из формул (10)–(16) и соотношения $\sigma_{ij}^{dip}(r, \theta) = \sigma_{ij}^d(r_0, \alpha, r, \theta) - \sigma_{ij}^d(0, \alpha, r, \theta)$. Функции $f(r_0, \rho, \alpha)$ и $g(r_0, \rho, \alpha)$ (фигурирующие в формуле (7)) рассчитываются из приведенных выше выражений, формулы (4) и соотношения $g(r_0, \rho, \alpha) = \sigma_{yy}^{dip} / (Db)$.

Рассмотрим теперь условия зарождения и роста нанотрещины на дислокации, образующейся в тройном стыке возле вершины большой эллиптической трещины (рис. 6 и 7). Пусть нанотрещина имеет длину l и образует угол $-\beta$ с плоскостью ГЗ, вдоль которой происходит зернограничное проскальзывание. В первом приближении мы пренебрежем взаимодействием между нанотрещиной и эллиптической трещиной. Иными словами, будем рассматривать рост нанотрещины в поле напряжений, создаваемых дислокационным диполем и приложенной нагрузкой в теле с эллиптической трещиной. Однако при рассмотрении роста нанотрещины будем моделировать ее как трещину, распространяющуюся в бесконечном теле, в котором действует такое поле напряжений. Таким образом, мы пренебрежем влиянием большой эллиптической трещины на дополнительное поле напряжений, возникающее в результате зарождения и роста нанотрещины.

Для расчета условий роста нанотрещины будем использовать следующий критерий роста нанотрещины [42]:

$$F > 2\gamma_e, \quad (17)$$

где F – конфигурационная сила, $\gamma_e = \gamma$, если нанотрещина растет внутри зерна, $\gamma_e = \gamma - \gamma_b / 2$, если нанотрещина растет вдоль границы зерен [31], а γ_b – удельная энергия границы зерен. В используемом приближении конфигурационная сила F рассчитывается по формуле [42]

$$F = \frac{\pi l(1-\nu)}{4G} (\bar{\sigma}_{nn}^2 + \bar{\sigma}_{\tau n}^2), \quad (18)$$

где τ – вектор, направленный от линии дислокации вдоль нанотрещины, n – нормаль к нанотрещине (рис. 7), σ_{nn} и $\sigma_{\tau n}$ – компоненты поля напряжений, созданного в твердом теле с эллиптической трещиной дислокационным диполем и внешней нагрузкой, а $\bar{\sigma}_{nn}$ и $\bar{\sigma}_{\tau n}$ – средневзвешенные значения этих напряжений. Величины $\bar{\sigma}_{nn}$ и $\bar{\sigma}_{\tau n}$ определяются соотношением [42]:

$$\bar{\sigma}_{kn} = \frac{2}{\pi l} \int_0^l \sigma_{kn} \sqrt{\frac{\tau}{l-\tau}} d\tau, \quad k = n, \tau. \quad (19)$$

Наряду с выполнением критерия (18) для роста нанотрещины будем требовать также, чтобы при зарождении нанотрещины напряжение σ_{nn} было положительно в плоскости нанотрещины. Подставляя (19) в (18), перепишем условие роста нанотрещины в виде $q > q_c$, где $q = (\pi l / 2) (\bar{\sigma}_{nn}^2 + \bar{\sigma}_{tn}^2)$ и $q_c = 4\gamma_e G / (1 - \nu)$.

В работе [33] с помощью формул (18) и (19) были рассчитаны условия роста внутризеренной нанотрещины для случаев нанокристаллического металла α -Fe и нанокристаллической керамики 3C-SiC. Для α -Fe использовались следующие типичные значения параметров: $\sigma_p = 31.7$ GPa, $\gamma = 1.42$ J/m² (см. работу [40] и ссылки в ней), $G = 82$ GPa, $\nu = 0.29$, $a = 2$ μ m, $\alpha = \pi / 3$. Для 3C-SiC использовались значения параметров $G = 217$ GPa [43], $\nu = 0.23$ [43], $\gamma = 1.5$ J/m² [44], $\sigma_p = 40$ GPa [45], $a = 2$ μ m и $\alpha = \pi / 3$.

Зависимости $q(l)$ изображены на рис. 8 для случаев нанокристаллического α -Fe (рис. 8 а-с) и нанокерамики 3C-SiC (рис. 8 d-f), $r_0 = 10$ nm и различных значений ρ и β . Горизонтальные линии на этом рисунке показывают значения q_c . Рост нанотрещины энергетически выгоден в областях, где $q(l)$ лежат выше горизонтальной линии $q = q_c$. Как следует из рис. 8, условия для зарождения и роста нанотрещин в нанокристаллических материалах становятся более "мягкими" с увеличением радиуса кривизны вершины трещины ρ .

Наряду с радиусом кривизны вершины трещины ρ важным параметром, влияющим на зарождение и рост нанотрещины, является расстояние r_0 от вершины затупленной трещины до дислокации в тройном стыке границ зерен. На рис. 9 приведены кривые $q(l)$ для α -Fe (а) и нанокерамики 3C-SiC (b) при $\beta = \pi / 2$ и различных значениях r_0 . Как следует из рис. 9, увеличение r_0 затрудняет образование достаточно большой нанотрещины (с длиной больше нескольких нанометров). Причина этого заключается в том, что при увеличении r_0 напряжения, создаваемые приложенной нагрузкой в плоскости нанотрещины, уменьшаются. Это уменьшение напряжений, создаваемых приложенной нагрузкой, оказывает большее влияние на рост нанотрещины, чем увеличение вектора Бюргерса при увеличении r_0 .

Следует отметить, что r_0 представляет собой длину границы зерен или ее части (рис. 6). Поэтому r_0 уменьшается при уменьшении размера зерна. При этом, поскольку уменьшение r_0 облегчает зарождение нанотрещин (см. рис. 9), процессы их зарождения и роста возле затупленных трещин становятся более вероятными/интенсивными в нанокристаллических материалах при уменьшении размеров их зерен.

Таким образом, в рамках модели [33] было показано следующее. Во-первых, условия для зарождения и роста нанотрещин в нанокристаллических материалах становятся более мягкими с увеличением радиуса кривизны вершины трещины ρ (рис. 8). Это означает, что затупление трещин (микромеханизм, который, как правило, отвечает за высокие показатели пластичности и вязкости разрушения в обычных поликристаллических металлах) не является эффективным для подавления хрупкости нанокристаллических материалов. Во-вторых, зарождение и рост нанотрещин в нанокристаллических материалах становятся более выраженными при уменьшении размеров их зерна (рис. 9). Иными словами, при уменьшении размера зерна пластичность нанокристаллического материала уменьшается.

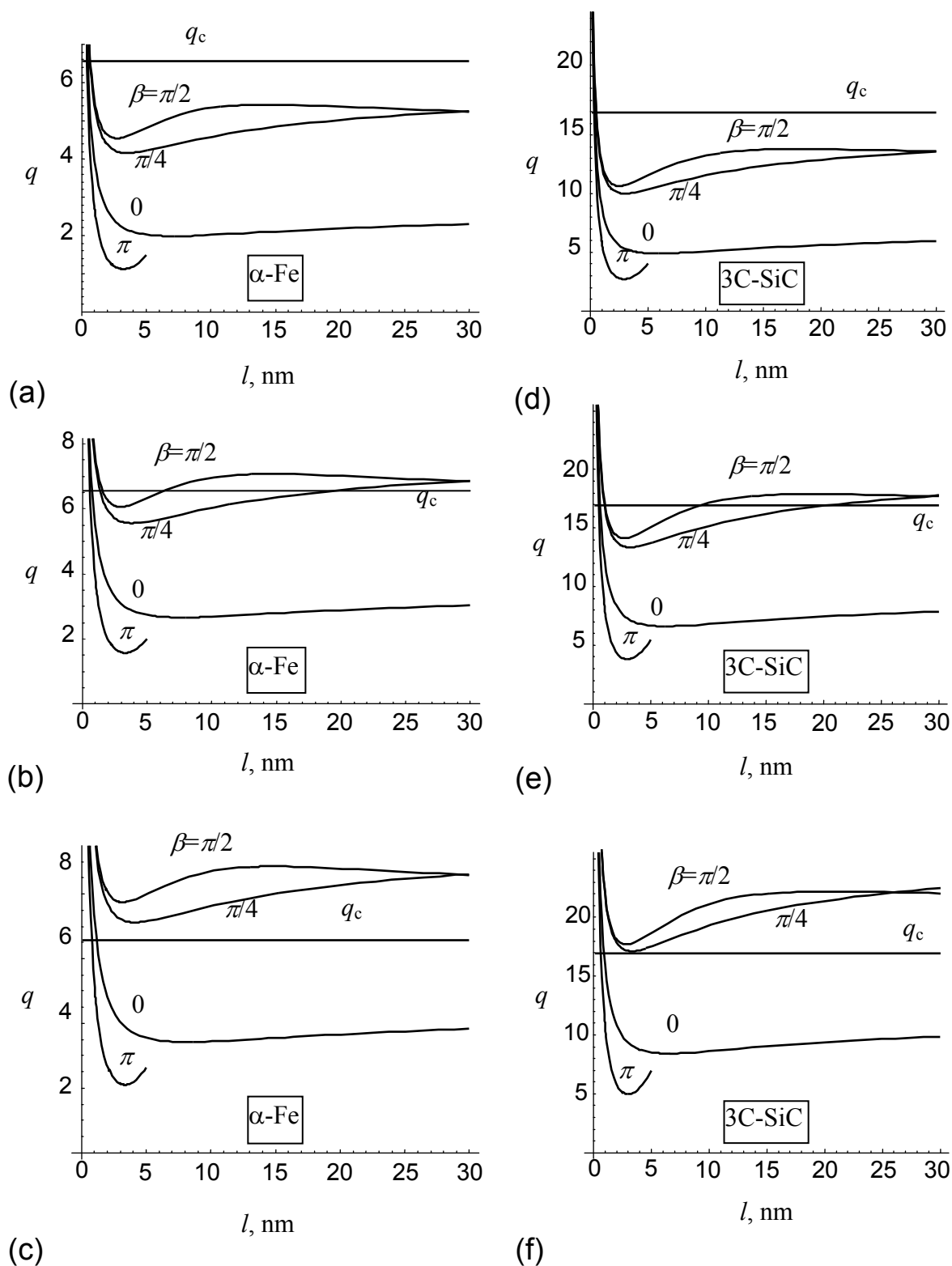


Рис. 8. Зависимости параметра q от длины нанотрещины l в нанокристаллическом α -Fe (a-c) и нанокерамике 3C-SiC (d-f) для $r_0 = 10$ nm и различных значений угла β и радиуса кривизны вершины трещины ρ : $\rho = 1.2$ nm (a), 1.5 nm (b), 1.8 nm (c), 2 nm (d), 2.5 nm (e) и 3 nm (f). Горизонтальные линии показывают значение параметра q_c .

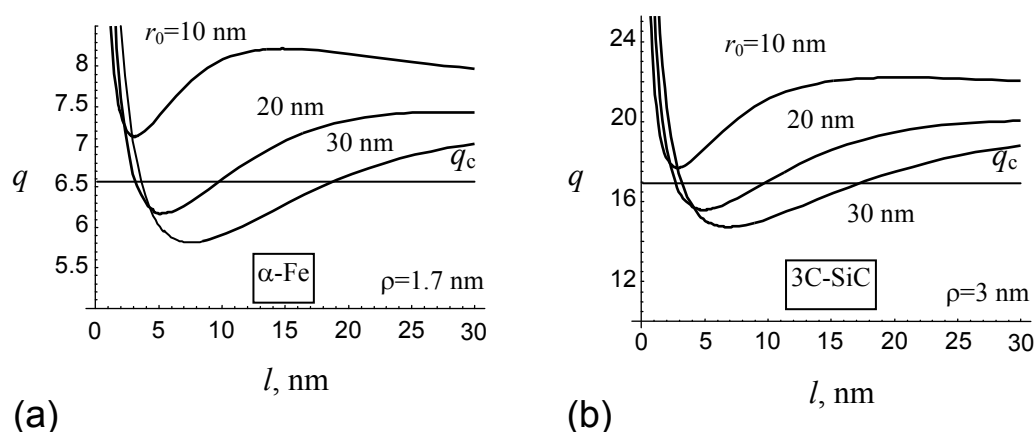


Рис. 9. Зависимости параметра q от длины нанотрещины l в нанокристаллическом α -Fe (a) и нанокерамики 3C-SiC (b) для $\beta = \pi/2$ и различных значений r_0 . Горизонтальные линии показывают значения параметра q_c .

Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными, касающимися низкой вязкости разрушения и пластичности большинства нанокристаллических материалов [3, 4], а также с экспериментально наблюдаемым вязко-хрупким переходом в некоторых нанокристаллических металлах при уменьшении размеров их зерен [23, 24].

5. Зарождение искривленных нанотрещин вблизи нановключений второй фазы в нанокompозитах

Нанотрещины - носители хрупкого межзеренного разрушения в наноматериалах обычно образуются и растут на внутренних поверхностях раздела (границах зерен и межфазных границах). Плоскости границ зерен изменяют свою пространственную ориентацию в тройных стыках, количество которых в нанокристаллических материалах очень велико. Вместе с тем, условия роста трещины весьма чувствительны к ориентации трещины. В рассматриваемой ситуации изменение направления роста нанотрещины на тройных стыках является элементарным процессом, который контролирует эволюцию хрупкого межзеренного разрушения в нанокристаллических материалах. Для описания изменения направления роста нанотрещины у тройных стыков, в работах [46, 47] предложены теоретические модели зарождения и эволюции искривленных нанотрещин в монофазных нанокристаллических металлах и нанокompозитах соответственно. В рамках моделей нанотрещины образуются и растут по границам зерен, изменяя направление своего роста на тройных стыках границ зерен и/или межфазных границ.

Рассмотрим, следуя [47], зарождение зернограничной нанотрещины в нанокompозитном металлическом материале, состоящем из нанокристаллической матрицы и наноразмерных включений с теми же упругими модулями, что и матрица роста. Включения имеют форму вытянутых стержней прямоугольного сечения и испытывают собственную дилатационную деформацию из-за несоответствия параметров решетки и коэффициентов теплового расширения матрицы и включения. На рис. 10 представлено типичное 2-мерное сечение нанокompозита. В матрице по границам зерен случайным образом распределены двухосные диполи стыковых и

зернограницных клиновых дисклинаций различной мощности $\pm \omega_i$ (с разными векторами Франка $\pm \omega_i$; здесь i – номер диполя). Плечи диполей ориентированы произвольным образом. Предполагается, что средняя длина плеча диполя примерно равна среднему размеру зерна d , а расстояние между центральными точками диполей существенно больше d . Таким образом, рассматривается хотя и неравновесная, но самоэкранированная и достаточно низкоэнергетическая дисклинационная структура.

Условимся считать, что такой ансамбль дисклинационных диполей можно разделить по их мощности $\pm \omega_i$ на «сильные» и «слабые» диполи. К «сильным» отнесем те диполи, на отрицательных дисклинациях которых при заданных условиях эксперимента могут зародиться нанотрещины [46, 47], к «слабым» – те, в ядрах которых релаксация упругих напряжений развивается по альтернативным и менее энергоемким механизмам, не связанным с зарождением трещин (например, за счет испускания дислокаций [46]). На рис. 10 дисклинации, образующие «сильные» диполи мощностью $\pm \omega_1$, обозначены большими треугольниками, а дисклинации, из которых составлены «слабые» диполи мощностью $\pm \omega_2$ – меньшими треугольниками. На отрицательных дисклинациях «сильных» диполей, в ядрах которых особенно велики растягивающие напряжения и деформации, зарождаются нанотрещины разрыва-сдвига. Эти трещины раскрываются вдоль границ зерен и на начальной стадии развития либо проходят мимо включений (трещины А и В на рис. 10), либо упираются в границу между включением и матрицей, раскалывая включение (трещина С на рис. 10) или отрывая его от матрицы (трещина D на рис. 10). Первый из этих случаев (трещина А) подробно рассматривался в книге [46] с приложением к однофазным нанокристаллическим материалам. Второй (трещина В) представляет собой альтернативу первому и реализуется, если транскристаллитное разрушение оказывается предпочтительнее интеркристаллитного (теоретический анализ зарождения прямолинейных трещин на прямолинейных же клиновых дисклинациях в однородной среде проводился в [48,49]). Остальные два случая (трещины С и D) анализируются в рамках обсуждаемой модели [47].

Из ансамбля дефектов, который схематично представлен на рис. 10, выделим одно включение и ближайший к нему «сильный» диполь с плечом L . Пусть на отрицательной дисклинации этого диполя зарождается нанотрещина, которая доходит до включения и затем раскрывается по схеме С или D. Начальную длину нанотрещины обозначим как R_1 , удельную энергию поверхности берегов разреза как γ_1 , мощность отрицательной дисклинации как $-\omega$ (рис. 11). Предполагается, что эта нанотрещина прорастает вдоль межзеренной границы AO . В качестве включения возьмем упругоизотропное тело, имеющие форму длинного параллелепипеда с поперечным сечением $2a \times 2b$, расположенное в бесконечной упругоизотропной среде. Упругие модули G и ν включения и матрицы предполагаются одинаковыми.

При этом включение испытывает собственную однородную дилатационную деформацию ε^* , вызванную различиями в значениях параметров кристаллических решеток и коэффициентов теплового расширения матрицы и включения. После достижения нанотрещиной границы включения она прорастает дальше на расстояние R_2 . В рамках модели рассматриваются случаи распространения нанотрещины внутри включения вдоль отрезка OB (трещина С на рис. 10) и по границе раздела “матрица-включение” вдоль отрезка OC (трещина D на рис. 10). Отрезки OB и OC характеризуются соответственно различными значениями удельной поверхностной энергии, γ_2 и γ_3 (рис. 11). Угол θ определяет отклонение нанотрещины от направления первоначального роста. Ниже приведены схема расчетов и результаты

численного анализа вероятного развития второго отрезка нанотрещины (длиной R_2), который может распространяться либо внутри включения, либо по границе «матрица-включение».

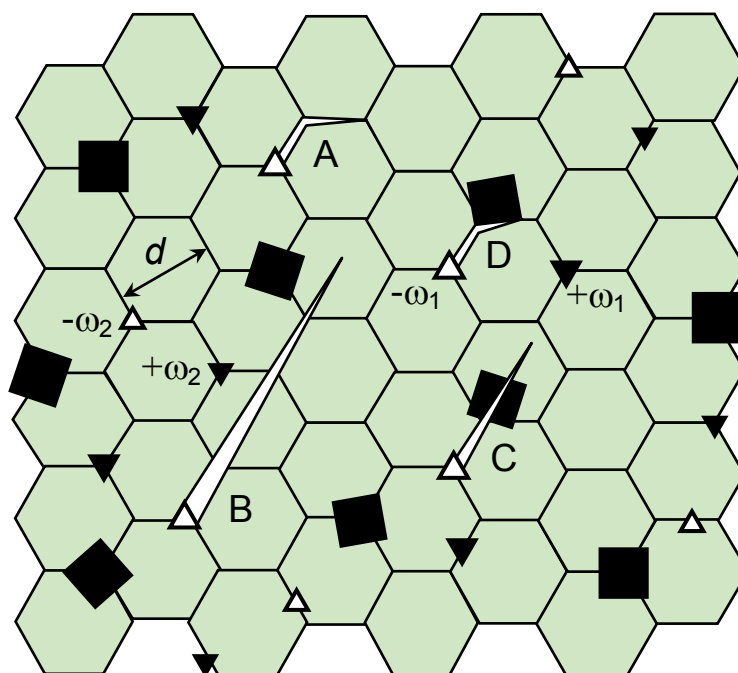


Рис. 10. (Color online) Модель нанокompозитного металлического материала, состоящего из нанокристаллической матрицы с размером зерна d и наноразмерных включений (черные квадраты). На границах зерен и в их тройных стыках показаны соответственно зернограничные и стыковые клиновые дисклинации, которые объединены в двухосные диполи. «Сильные» диполи мощностью $\pm\omega_1$, на которых способны зарождаться нанотрещины, показаны более крупными треугольниками, «слабые» диполи мощностью $\pm\omega_2$ – более мелкими. На отрицательных дисклинациях, принадлежащих «сильным» диполям, зарождаются нанотрещины, которые проходят мимо включений (трещины A и B) или упираются в границы «матрица-включение», раскалывая эти включения (трещина C) или огибая их по границам (трещина D).

На первом участке длиной R_1 (рис. 11) нанотрещина раскрывается под действием нормальных, $\sigma_{\theta\theta}^d(r, \theta = \pi + \alpha)$ и $\sigma_{\theta\theta}^i(r, \theta = \pi + \alpha)$, и сдвиговых, $\sigma_{r\theta}^d(r, \theta = \pi + \alpha)$ и $\sigma_{r\theta}^i(r, \theta = \pi + \alpha)$, компонент полей напряжений дисклинационного диполя ($\sigma_{i\theta}^d$) и включения ($\sigma_{i\theta}^i$). На втором участке длиной R_2 нанотрещина также развивается как трещина одновременно нормального разрыва и плоского сдвига в поле нормальных, $\sigma_{\theta\theta}^d(r, \theta)$ и $\sigma_{\theta\theta}^i(r, \theta)$, и сдвиговых, $\sigma_{r\theta}^d(r, \theta)$ и $\sigma_{r\theta}^i(r, \theta)$, напряжений дисклинационного диполя и включения. Указанные компоненты тензора напряжений дисклинационного диполя и включения записаны в цилиндрической системе координат (r, θ) с центром в точке O (рис. 11).

$$\sigma_{zz}^d = \nu(\sigma_{xx}^d + \sigma_{yy}^d), \quad (20)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, $x_0 = L \sin \beta$ и $y_0 = L \cos \beta$ – координаты положительной дисклинации, $x_1 = R_1 \cos \alpha$ и $y_1 = R_1 \sin \alpha$ – координаты отрицательной дисклинации. Ненулевые компоненты тензора напряжений включения можно представить в виде [46]:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^i &= 2D\varepsilon^*(1+\nu) \left(\arctan \frac{x-\xi+a}{y} - \arctan \frac{x-\xi-a}{y} - \arctan \frac{x-\xi+a}{y-2b} + \arctan \frac{x-\xi-a}{y-2b} \right), \\ \sigma_{yy}^i &= 2D\varepsilon^*(1+\nu) \left(\arctan \frac{y}{x-\xi+a} - \arctan \frac{y}{x-\xi-a} - \arctan \frac{y-2b}{x-\xi+a} + \arctan \frac{y-2b}{x-\xi-a} \right), \\ \sigma_{xy}^i &= D\varepsilon^*(1+\nu) \ln \frac{[(x-\xi-a)^2 + y^2][(x-\xi+a)^2 + (y-2b)^2]}{[(x-\xi+a)^2 + y^2][(x-\xi-a)^2 + (y-2b)^2]}, \\ \sigma_{zz}^d &= \sigma_{xx}^d + \sigma_{yy}^d, \end{aligned} \quad (21)$$

где $\xi = a(1-2k)$. При изменении k от 0 до 1 точка O , в которой межзеренная граница AO упирается в включение, перемещается по нижней границе включения от его левого угла к правому (рис. 11). С помощью формул (20) и (21) и преобразования координат $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$ искомые компоненты поля напряжений дисклинационного диполя и включения в цилиндрической системе координат (r, θ) , могут быть записаны в общем виде:

$$\sigma_{\theta\theta}^j(r, \theta) = \sigma_{xx}^j \sin^2 \theta + \sigma_{yy}^j \cos^2 \theta - 2\sigma_{xy}^j \sin \theta \cos \theta, \quad (22)$$

$$\sigma_{r\theta}^j(r, \theta) = (\sigma_{yy}^j - \sigma_{xx}^j) \sin \theta \cos \theta + \sigma_{xy}^j (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta), \quad (23)$$

где $j = d, i$.

Для количественной оценки условий зарождения нанотрещины проведем расчет ее равновесной длины $R = R_1 + R_2$. Это можно сделать, используя метод “конфигурационной силы” [42]. Конфигурационная сила F , имеющая смысл работы упругого поля, затраченной на увеличение размера трещины на единицу длины, записывается в нашем случае плоской деформации в виде [42]:

$$F = \frac{\pi(1-\nu)R}{4G} (\bar{\sigma}_{\theta\theta}^2 + \bar{\sigma}_{r\theta}^2), \quad (24)$$

где $\bar{\sigma}_{\theta\theta}$ и $\bar{\sigma}_{r\theta}$ – средние взвешенные значения соответствующих компонент $\sigma_{\theta\theta}^d$, $\sigma_{\theta\theta}^i$ и $\sigma_{r\theta}^d$, $\sigma_{r\theta}^i$, определяемых формулами (22) и (23). Эти средние взвешенные напряжения могут быть вычислены с помощью следующих формул:

$$\bar{\sigma}_{\theta\theta} = \frac{2}{\pi R} \left\{ \int_0^{R_1} [\sigma_{\theta\theta}^d(r, \theta = \pi + \alpha) + \sigma_{\theta\theta}^i(r, \theta = \pi + \alpha)] \sqrt{\frac{r}{R_1 - r}} dr + \int_0^{R_2} [\sigma_{\theta\theta}^d(r, \theta) + \sigma_{\theta\theta}^i(r, \theta)] \sqrt{\frac{r}{R_2 - r}} dr \right\}, \quad (25)$$

$$\bar{\sigma}_{r\theta} = \frac{2}{\pi R} \left\{ \int_0^{R_1} [\sigma_{r\theta}^d(r, \theta = \pi + \alpha) + \sigma_{r\theta}^i(r, \theta = \pi + \alpha)] \sqrt{\frac{r}{R_1 - r}} dr + \int_0^{R_2} [\sigma_{r\theta}^d(r, \theta) + \sigma_{r\theta}^i(r, \theta)] \sqrt{\frac{r}{R_2 - r}} dr \right\}. \quad (26)$$

Подставляя формулы (25) и (26) в выражение для конфигурационной силы (24) и приравнявая ее к удвоенной удельной энергии поверхности берегов трещины 2γ , получаем следующее выражение для определения равновесной длины трещины R :

$$\frac{8G\gamma}{\pi(1-\nu)R} = \bar{\sigma}_{\theta\theta}^2 + \bar{\sigma}_{r\theta}^2, \quad (27)$$

где $\gamma = (\gamma_1 R_1 + \gamma_i R_2) / (R_1 + R_2)$, $i = 2, 3$. Так как на первом (длиной R_1) и втором (длиной R_2) отрезках поверхность берегов нанотрещины характеризуется различной удельной энергией, то в уравнение (27) подставляется удельная энергия γ , усредненная по всей длине нанотрещины R .

В общем случае полученное трансцендентное уравнение (27) может быть решено только численно. Используя это уравнение, в работе [47] были получены численные оценки равновесных длин нанотрещины в зависимости от параметров металлических нанокомпозитов. В частности, были выявлены следующие тенденции [47].

(1) В случае, когда граница зерна AO упирается в угол включения ($k = 0$), нанотрещина отклоняется от первоначального пути распространения и развивается далее вдоль границы “матрица-включение” при любых значениях углов α и β . По мере смещения точки контакта границы AO и включения к центру его нижней границы (с ростом k) усиливается тенденция прямолинейного развития нанотрещины внутри включения. Причиной изменения пути развития нанотрещины является концентрация сдвиговых напряжений включения в его углах и вдоль его границ. При $k = 0$ нанотрещина развивается в основном под действием сдвиговых напряжений включения, но по мере приближения к центральной точке нижней границы включения ($k \approx 0.5$) вклад его сдвиговых напряжений уменьшается и нанотрещина, в основном, развивается под действием нормальной компоненты напряжений включения.

(2) Зарождение рассматриваемой нанотрещины наиболее вероятно вблизи включения, которое испытывает собственную дилатационную деформацию сжатия ($\varepsilon^* < 0$). Это естественно, поскольку собственная деформация сжатия включения вызывает в нем упругое растяжение (например, при понижении температуры включения, обладающее более высоким коэффициентом теплового расширения, чем матрица, стремится сжаться сильнее матрицы и оказывается в итоге в растянутом состоянии). В этом случае упругое поле включения «помогает» раскрытию нанотрещины. В обратной ситуации, при $\varepsilon^* > 0$, упругое поле включения

«препятствует» раскрытию нанотрещины, и последняя раскрывается под действием поля дисклинационного диполя. В меньшей мере это выражено для нанотрещин, прорастающих по границам «матрица-включение», но и для них влияние знака собственной деформации оказывается очень существенным.

(3) Увеличение размера включения, которое испытывает собственную дилатационную деформацию сжатия ($\varepsilon^* < 0$), приводит к повышению вероятности зарождения нанотрещины, огибающей включение по границе раздела «матрица-включение». Этот результат представляется естественным, поскольку вклад от поля напряжений включения растет с увеличением его размера. Для включений с изменением знака собственной деформации ε^* на противоположный ($\varepsilon^* > 0$) приведет к обратной ситуации, когда уменьшение размера включения увеличивает вероятность развития нанотрещины вдоль границы раздела.

6. Заключение

Таким образом, в нанокристаллических материалах экспериментально наблюдаются как быстрые процессы межзеренного хрупкого разрушения, так и сравнительно медленные процессы вязкого разрушения. Межзеренное хрупкое разрушение реализуется посредством образования множества наноскопических и микроскопических трещин на границах зерен и их последующего роста и/или слияния. В частности, хрупкое разрушение эффективно реализуется при высоких скоростях деформирования. Вязкое разрушение реализуется посредством механизма коалесценции микропор.

Типичными элементарными трещинами в нанокристаллических материалах являются нанотрещины, зародившиеся на границах зерен и их тройных стыках в полях напряжений дислокаций, образовавшихся в результате межзеренного скольжения (рис 6). Искривленные трещины (рис. 10) также представляют собой типичные носители процесса разрушения, поскольку нанокристаллические и нанокомпозитные материалы содержат ансамбли искривленных (в тройных стыках) границ зерен и межфазных границ, вдоль которых часто зарождаются и растут трещины. Эволюция типичных нанотрещин при механическом нагружении задает механизм разрушения, который действует в нанокристаллических материалах и зависит от его структурных характеристик (прежде всего, размера зерен), параметров материала и условий нагружения.

В нанокристаллических металлических материалах со сверхмелкими зернами и нанокерамиках пластическое течение реализуется, главным образом, по границам зерен. При этом, вследствие стесненности пластического сдвига на тройных стыках границ зерен, такие стыки являются источниками высоких локальных напряжений. Релаксация этих локальных напряжений эффективно реализуется посредством зарождения нанотрещин на тройных стыках границ зерен (рис. 6). Данный процесс интенсифицируется вблизи вершин микротрещин и других концентраторов напряжений в нанокристаллических материалах при квазистатическом деформировании. Также, зарождение нанотрещин на тройных стыках границ зерен эффективно реализуется под действием сверхвысоких напряжений при высокоскоростном деформировании.

При высокоскоростном деформировании нанокристаллические материалы демонстрируют специфическое поведение. В частности, согласно экспериментальным данным [26] по высокоскоростному деформированию нанокристаллического Ni (со скоростью деформации более 10^7 с^{-1} и напряжениями в диапазоне 20-70 ГПа), в образце образуется воронка с приповерхностной аморфной фазой (рис. 4) и реализуется пластическая деформация окружающего нанокристаллического материала. При этом

основными микроструктурными особенностями образцов нанокристаллического Ni после высокоскоростного деформирования являются сохранение исходного нанокристаллического состояния с исходными (до удара) величинами среднего размера зерен и высокая плотность решеточных дислокаций [26]. Результаты [20] молекулярно-динамического моделирования поведения нанокристаллического алюминия при ударном нагружении свидетельствуют о действии мод зернограницной пластической деформации и решеточного скольжения во фронте ударной волны (рис. 3). Также, в работе [19] по молекулярно-динамическому моделированию ударного нагружения нанокристаллической меди были выявлены аномально высокие значения ее прочности в областях позади фронта ударной волны (рис. 2).

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0353) и программы Президиума РАН «Фундаментальные исследования нанотехнологий и наноматериалов».

Литература

- [1] A.N. Gus, Ya.Ya. Rushchitskii // *Int. Appl. Mech.* **39** (2003) 1271.
- [2] Р.В. Гольдштейн, Н.Ф. Морозов // *Физ. Мезомеханика* **10** (2007) 17.
- [3] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [4] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [5] P. Cavaliere // *Int. J. Fatigue* **31** (2009) 1476.
- [6] H.A. Padilla II, B.L. Boyce // *Exp. Mechanics* **50** (2010) 5.
- [7] K.M.Youssef, R.O. Scattergood, K.L. Murty, J.A. Horton, C.C. Koch // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 091904.
- [8] X. Zhou, D.M. Hulbert, J.-D. Kuntz, R.K. Sadangi, V. Shukla, B.H. Kear, A.K. Mukherjee // *Mater. Sci. Eng. A* **394** (2005) 353.
- [9] G.-D. Zhan, J.E. Garay and A.K. Mukherjee // *Nano Lett.* **5** (2005) 2593.
- [10] K.M.Youssef, R.O. Scattergood, K.L. Murty, C.C. Koch // *Scr. Mater.* **54** (2006) 251.
- [11] X. Xu, T. Nishimura, N. Hirotsaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka // *Acta Mater.* **54** (2006) 255.
- [12] D.M. Hulbert, D. Jiang, J.D. Kuntz, Y. Kodera, A.K. Mukherjee // *Scr. Mater.* **56** (2007) 1103.
- [13] A. Dominguez-Rodriguez, D. Gomez-Garcia, E. Zapata-Solvez, J.Z. Chen, R. Chaim // *Scr. Mater.* **56** (2007) 89.
- [14] H. Liu, C. Huang, X. Teng, H. Wang // *Mater. Sci. Eng. A* **487** (2008) 258.
- [15] R.A. Andrievski // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **21** (2009) 107;
- [16] C. Hu, Y. Sakka, S. Grasso, T. Nishimura, S. Guo, H. Tanaka // *Scr. Mater.* **64** (2011) 765.
- [17] D. Farkas, S. Petegem, P.M. Derlet, H. Van Swygenhoven // *Acta Mater.* **53** (2005) 3115.
- [18] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Acta Mater.* **53** (2005) 1.
- [19] E.M. Bringa, A. Caro, Y. Wang, M. Victoria, J.M. McNaney, B.A. Remington, R.F. Smith, B.R. Torralva, H. Van Swygenhoven // *Science* **309** (2005) 1838.
- [20] W. Ma, W. Zhu, F. Jing // *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 121903.
- [21] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang // *Acta Mater.* **51** (2003) 387.
- [22] K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven, S. Suresh // *Acta Mater.* **51** (2003) 5743.
- [23] H. Li, F. Ebrahimi // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 4307.
- [24] H. Li, F. Ebrahimi // *Adv. Mater.* **17** (2005) 1969.

- [25] R.C. Hugo, H. Kung, J.R. Weertman, R. Mitra, J.A. Knapp, D.M. Follstaedt // *Acta Mater.* **51** (2003) 1937.
- [26] Y.M. Wang, E.M. Bringa, J.M. McNaney, M. Victoria, A. Caro, A.M. Hodge, R. Smith, B. Torralva, B.A. Remington, C.A. Schuh, H. Jamarkani, M.A. Meyers // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 061917.
- [27] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 211901.
- [28] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **56** (2008) 1642.
- [29] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **98** (2011) 181909.
- [30] D. Farkas, H. Van Swygenhoven, P.M. Derlet // *Phys. Rev. B* **66** (2002) 060101 (R).
- [31] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **52** (2004) 1201.
- [32] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phys. Rev. B* **77** (2008) 054109.
- [33] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Eur.J. Mech. A* (2012), in press.
- [34] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Int. J. Plasticity* **26** (2010) 1629.
- [35] G.E. Beltz, D.M. Lipkin, L.L. Fischer // *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 4468.
- [36] M. Huang, Z. Li // *J. Mech. Phys. Solids* **52** (2004) 1991.
- [37] T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids* (Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1987).
- [38] Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Атомиздат, М., 1974).
- [39] L.L. Fischer, G.E. Beltz // *J. Mech. Phys. Sol.* **49** (2001) 635.
- [40] G.E. Beltz, D.M. Lipkin, L.L. Fischer // *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 4468.
- [41] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **58** (2010) 5286.
- [42] V.L. Indembom // *Sov. Phys. Solid State* **3** (1961) 1506.
- [43] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2004) 184117.
- [44] S.P. Mehandru, A.B. Anderson // *Phys. Rev. B* **42** (1990) 9040.
- [45] J.J. Petrovic, J.V. Milewski, D. L. Rohr, F.D. Gac // *J. Mater. Sci.* **20** (1985) 1167.
- [46] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials*. (Springer, Berlin-Heidelberg- N.Y., 2004).
- [47] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба // *ФТТ* **49** (2007) 252.
- [48] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Phil. Mag. A* **70** (1994) 561.
- [49] M.S. Wu, H. Zhou // *Int. J. Fracture* **82** (1996) 381.
- [50] A.E. Romanov and V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro (North Holland, Amsterdam, 1992), vol. 9, p. 191.

CRACK GENERATION IN NANOMATERIALS AT HIGH-STRAIN-RATE AND QUASISTATIC REGIMES OF DEFORMATION

I.A. Ovid'ko^{1,2}

¹Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,
Bolshoj 61, Vasil. Ostrov, St. Petersburg 199178, Russia

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

email: ovidko@nano.ipme.ru

Abstract. An overview of experimental data, computer simulations and theoretical models on crack generation in nanocrystalline materials at high-strain-rate and quasistatic deformation regimes is presented. The basic experimentally documented facts and results of computer

simulations in this area are discussed. A special attention is paid to theoretical models describing processes of nanoscopic crack generation near microcrack tips and second-phase nanoinclusions in nanocrystalline materials at high-strain-rate and quasistatic deformation regimes.

References

- [1] A.N. Gus, Ya.Ya. Rushchitskii // *Int. Appl. Mech.* **39** (2003) 1271.
- [2] R.V. Goldstein, N.F. Morozov // *Phys. Mesomechanics* **10** (2007) 235.
- [3] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [4] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [5] P. Cavaliere // *Int. J. Fatigue* **31** (2009) 1476.
- [6] H.A. Padilla II, B.L. Boyce // *Exp. Mechanics* **50** (2010) 5.
- [7] K.M.Youssef, R.O. Scattergood, K.L. Murty, J.A. Horton, C.C. Koch // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 091904.
- [8] X. Zhou, D.M. Hulbert, J.-D. Kuntz, R.K. Sadangi, V. Shukla, B.H. Kear, A.K. Mukherjee // *Mater. Sci. Eng. A* **394** (2005) 353.
- [9] G.-D. Zhan, J.E. Garay and A.K. Mukherjee // *Nano Lett.* **5** (2005) 2593.
- [10] K.M.Youssef, R.O. Scattergood, K.L. Murty, C.C. Koch // *Scr. Mater.* **54** (2006) 251.
- [11] X. Xu, T. Nishimura, N. Hirosaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka // *Acta Mater.* **54** (2006) 255.
- [12] D.M. Hulbert, D. Jiang, J.D. Kuntz, Y. Kodaera, A.K. Mukherjee // *Scr. Mater.* **56** (2007) 1103.
- [13] A. Dominguez-Rodriguez, D. Gomez-Garcia, E. Zapata-Solvez, J.Z. Chen, R. Chaim // *Scr. Mater.* **56** (2007) 89.
- [14] H. Liu, C. Huang, X. Teng, H. Wang // *Mater. Sci. Eng. A* **487** (2008) 258.
- [15] R.A. Andrievski // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **21** (2009) 107;
- [16] C. Hu, Y. Sakka, S. Grasso, T. Nishimura, S. Guo, H. Tanaka // *Scr. Mater.* **64** (2011) 765.
- [17] D. Farkas, S. Petegem, P.M. Derlet, H. Van Swygenhoven // *Acta Mater.* **53** (2005) 3115.
- [18] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Acta Mater.* **53** (2005) 1.
- [19] E.M. Bringa, A. Caro, Y. Wang, M. Victoria, J.M. McNaney, B.A. Remington, R.F. Smith, B.R. Torralva, H. Van Swygenhoven // *Science* **309** (2005) 1838.
- [20] W. Ma, W. Zhu, F. Jing // *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 121903.
- [21] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang // *Acta Mater.* **51** (2003) 387.
- [22] K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven, S. Suresh // *Acta Mater.* **51** (2003) 5743.
- [23] H. Li, F. Ebrahimi // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 4307.
- [24] H. Li, F. Ebrahimi // *Adv. Mater.* **17** (2005) 1969.
- [25] R.C. Hugo, H. Kung, J.R. Weertman, R. Mitra, J.A. Knapp, D.M. Follstaedt // *Acta Mater.* **51** (2003) 1937.
- [26] Y.M. Wang, E.M. Bringa, J.M. McNaney, M. Victoria, A. Caro, A.M. Hodge, R. Smith, B. Torralva, B.A. Remington, C.A. Schuh, H. Jamarkani, M.A. Meyers // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 061917.
- [27] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 211901.
- [28] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **56** (2008) 1642.
- [29] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **98** (2011) 181909.
- [30] D. Farkas, H. Van Swygenhoven, P.M. Derlet // *Phys. Rev. B* **66** (2002) 060101 (R).

- [31] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **52** (2004) 1201.
- [32] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phys. Rev. B* **77** (2008) 054109.
- [33] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Eur.J. Mech. A* (2012), in press.
- [34] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Int. J. Plasticity* **26** (2010) 1629.
- [35] G.E. Beltz, D.M. Lipkin, L.L. Fischer // *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 4468.
- [36] M. Huang, Z. Li // *J. Mech. Phys. Solids* **52** (2004) 1991.
- [37] T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids* (Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1987).
- [38] J.P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [39] L.L. Fischer, G.E. Beltz // *J. Mech. Phys. Sol.* **49** (2001) 635.
- [40] G.E. Beltz, D.M. Lipkin, L.L. Fischer // *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 4468.
- [41] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **58** (2010) 5286.
- [42] V.L. Indembom // *Sov. Phys. Solid State* **3** (1961) 1506.
- [43] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2004) 184117.
- [44] S.P. Mehandru, A.B. Anderson // *Phys. Rev. B* **42** (1990) 9040.
- [45] J.J. Petrovic, J.V. Milewski, D. L. Rohr, F.D. Gac // *J. Mater. Sci.* **20** (1985) 1167.
- [46] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials*. (Springer, Berlin-Heidelberg- N.Y., 2004).
- [47] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Phys. Solid State* **49** (2007) 261.
- [48] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Phil. Mag. A* **70** (1994) 561.
- [49] M.S. Wu, H. Zhou // *Int. J. Fracture* **82** (1996) 381.
- [50] A.E. Romanov and V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro (North Holland, Amsterdam, 1992), vol. 9, p. 191.