

# ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ИСПУСКАНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ ГРАНИЦАМИ ЗЕРЕН В ДЕФОРМИРУЕМЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

С.В. Бобылев<sup>1,2\*</sup>

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

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

\*email: bobylev.s@gmail.com

**Аннотация.** Представлен обзор теоретических моделей испускания решеточных дислокаций границами зерен в нанокристаллических материалах при пластической деформации. Показано, что в условиях подавления стандартных дислокационных источников, границы зерен могут выступать в качестве эффективных альтернативных источников мобильных дислокаций. Рассмотренные механизмы испускания дислокаций из границ зерен объясняют некоторые специфические особенности пластической деформации наноматериалов, наблюдаемые в экспериментах.

## 1. Введение

Нанокристаллическими материалами называются одно- или многофазные поликристаллические твердые тела с размером зерна менее 100 нм. При таком малом размере зерна значительная доля объема микроструктуры нанокристаллических материалов состоит из границ раздела (границ зерен). Как следствие, свойства нанокристаллов существенно отличаются (зачастую в лучшую сторону) от обычных крупнозернистых поликристаллов [1]. Примером таких свойств, имеющих потенциальное значение для инженерных приложений являются сверхвысокие пределы текучести и прочности, пониженное относительное удлинение, исключительная износостойкость и потенциальная возможность сверхпластичности при более низких температурах и больших скоростях деформации по сравнению с крупнозернистыми поликристаллами.

По сравнению с обычными поликристаллами (с размерами зерен порядка микрометров) значительно большая доля объема нанокристаллов занята границами зерен. Например, для размера зерна 10 нм от 14 % до 27 % атомов находятся на расстояниях 0.5–1.0 нм от плоскостей границ зерен [2]. Поэтому, естественно полагать, что границы зерен играют весомую роль в процессе пластической деформации нанокристаллических материалов.

Специфические особенности деформационных процессов в нанокристаллических материалах проявляют себя в отклонениях от известных законов, связывающих свойства поликристаллических материалов с размером их зерна. Классический закон Холла-Петча [3, 4] описывает соотношение между пределом текучести  $\tau$  и размером

зерна  $d$  поликристаллического материала:

$$\tau = \tau_0 + K d^{-1/2}, \quad (1)$$

где  $\tau_0$  – некоторое напряжение трения, которое необходимо для скольжения дислокаций в монокристалле, а  $K$  — материальная константа, часто именуемая “коэффициентом Холла-Петча”. Этот закон хорошо выполняется для поликристаллов с размером зерна больше 1 микрометра. С появлением нанокристаллических материалов с размерами зерна от нескольких единиц до нескольких десятков нанометров, оказалось, что классический закон Холла-Петча (1) в таком диапазоне всегда, в той или иной мере, нарушается [5]. Детальный анализ экспериментальных зависимостей типа Холла-Петча, полученных к настоящему времени для большого количества разных материалов, позволяет выделить следующие три характерные области размеров зерен: (I) область от монокристалла, когда размер зерна  $d$  совпадает с размером образца, до поликристалла с размером зерна порядка одного микрометра, в которой можно использовать классический закон Холла-Петча; (II) область изменения  $d$  примерно от одного микрометра до 30 нанометров, в которой зависимость Холла-Петча приблизительно сохраняется, но отличается от классической тем, что показатель степени при  $d$  изменяется от классического значения  $-0.5$  до почти нулевого; (III) область очень малых  $d$  (меньших некоторого критического значения  $d^*$ , при котором коэффициент Холла-Петча становится приблизительно равен нулю), когда дальнейшее измельчение зерна уже или не дает упрочнения, или же дает разупрочнение [6].

Границы зерен в нанокристаллах играют одну из ключевых ролей в процессе пластической деформации, однако конкретный механизм их воздействия зависит от предлагаемой модели деформационного процесса. Теоретические модели пластической деформации в нанокристаллических материалах можно разделить на следующие группы: (1) модели, в которых доминируют механизмы обычного движения решеточных дислокаций; (2) модели механизмов двойникования; (3) модели механизмов зернограницной пластичности (зернограницное проскальзывание, диффузионная пластичность по границам зерен); (4) модели описания предела текучести нанокристаллического материала на базе различных “правил смеси”. Ряд моделей учитывает конкуренцию между разными механизмами деформации, поскольку в реальных материалах, как правило, действуют несколько механизмов одновременно. Охватить все многообразие моделей пластической деформации, так или иначе связанных с границами зерен, вряд ли возможно в рамках одной статьи. Поэтому в настоящем обзоре мы рассмотрим модели, имеющие дело с испусканием дислокаций из границ зерен, которые, в основном, попадают в первые две группы из перечисленных, но также зачастую работают совместно с механизмами третьей группы (зернограницная пластичность).

## 2. Трансформации границ зерен в нанокристаллических материалах

В нанокристаллических материалах в силу малости размера зерна стандартный механизм деформации – скольжение решеточных дислокаций в теле зерна – может быть значительно затруднен. Одной из основных причин этого затруднения является подавление действия обычных дислокационных источников (например, типа Франка-Рида). В этих условиях на первое место могут выходить такие механизмы пластической деформации как: зернограницное проскальзывание, диффузионная ползучесть по границам зерен и тройным стыкам. Однако обычное скольжение решеточных дислокаций может достаточно эффективно работать, если существуют альтернативные

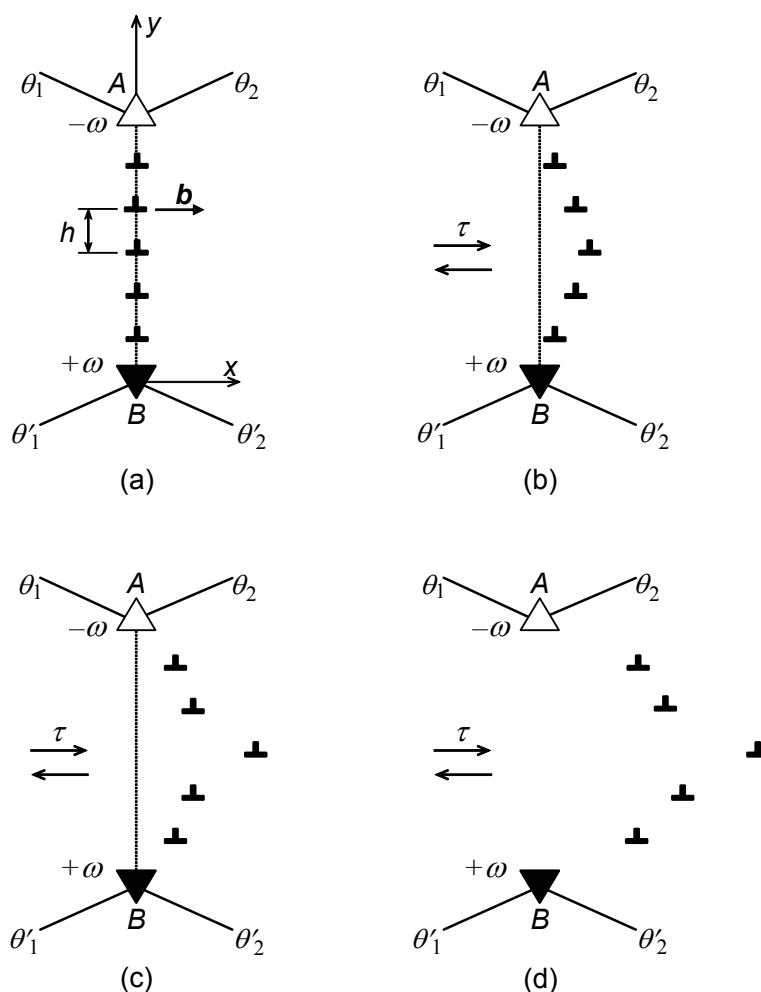
источники подвижных дислокаций. Экспериментальные данные Вея и др. [7] по исследованию деформации нанокристаллического железа наводят на мысль, что таким источником могут быть малоугловые границы зерен, распад которых в процессе нагружения материала обеспечивает большое количество подвижных решеточных дислокаций.

Так Бата и Перелома [8] предложили альтернативное объяснение зависимости Холла-Петча, прямо связанное с изменением энергии границ зерен при испускании дислокаций. В их модели показано, что коэффициент Холла-Петча прямо пропорционален работе, которую необходимо совершить для «извлечения» дислокации из границы зерна, а эта работа, в свою очередь, совершается на дистанции пропорциональной  $d^{-1/2}$ . Указанная энергия рассчитывалась путем прямого учета взаимодействия выбранной дислокации со всеми дислокациями границы зерна, а также с дислокациями соседних границ. При этом не рассматривалось как таковое зарождение дислокаций, все дислокации изначально существовали в составе стенок решеточных дислокаций, которыми моделировались границы зерен. Таким образом, в модели [8] рассматривалась весьма искусственная структура, образованная исключительно стенками решеточных дислокаций, каковые являются единственным источником подвижных дислокаций. Подобная грубая модель, тем не менее, может иметь применение для нанокристаллических материалов, где прочие дислокационные источники действительно могут отсутствовать. В рамках описанных выше модельных предположений было установлено, что напряжение течения прямо пропорционально  $d^{-1/2}$  в полном соответствии с зависимостью Холла-Петча вплоть до размеров зерен  $\sim 5$  мкм, при меньших размерах наблюдается отклонение от линейной зависимости. Распространение модели на очень малые размеры зерен (что по словам авторов скорее всего выходит за рамки применимости модели) показало, что при размерах зерен менее 25–40 нм (для Fe и Cu) происходит переход к аномальной зависимости Холла-Петча, т.е. материал разупрочняется при уменьшении размера зерна, что согласуется с экспериментами.

Одним из недостатков модели [8] является тот факт, что в расчетах положение всех дислокаций кроме испускаемой из границы полагалось жестко фиксированным, хотя все дислокации в стенке полагались одинаковыми, и под действием приложенного напряжения они должны смещаться синхронно из исходных позиций. Сходный процесс более детально был рассмотрен в работе [9], авторы которой теоретически описали распад малоугловых границ под действием внешнего сдвигового напряжения как процесса, приводящего к появлению большого количества мобильных дислокаций в локальных областях нанокристаллических материалов. Также они предложили теоретическую модель, описывающую трансформации в большеугловых границах, такие как: прогиб границ зерен и испускание частичных дислокаций под действием внешнего напряжения.

Следуя [9], рассмотрим модель малоугловой границы наклона, обрывающейся на тройных стыках в нанокристаллическом образце (рис. 1а). В исходном состоянии при отсутствии механической нагрузки граница представляется как стенка периодически упорядоченных краевых дислокаций с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  и характеризуется углом разориентировки  $\theta$ , находящимся в соотношении Франка ( $\sin(\theta/2) = b/2h$  [10]) с параметрами дислокационной структуры границы (периодом  $h$  и модулем вектора Бюргерса  $b$ ). Для определенности будем считать, что угол разориентировки  $\theta$  находится в компенсационных соотношениях  $\theta + \theta_1 + \theta_2 = 0$  и  $-\theta + \theta'_1 + \theta'_2 = 0$  с углами разориентировки,  $(\theta_1, \theta_2)$  и  $(\theta'_1, \theta'_2)$ , границ зерен соседних, соответственно, с верхним и нижним тройными стыками (рис. 1а). Другими словами, дислокационная стенка в

исходном состоянии (рис. 1a) обрывается на дисклинациях, которые полностью компенсируют дисклинационные дефекты (показаны треугольниками на рис. 1) соседних границ зерен.



**Рис. 1.** Малоугловая граница наклона, представляемая в виде стенки краевых дислокаций. (a) В исходном состоянии; (b) после приложения внешнего напряжения  $\tau$ ; (c) первая дислокация отрывается от границы; (d) полный распад границы. Reprinted from [9]. Copyright 2004, with permission from Elsevier.

Под действием напряжения сдвига  $\tau$  дислокации смещаются из их исходных позиций (рис. 1a) в новые положения равновесия (рис. 1b), т.е. граница прогибается. При некотором критическом значении напряжения  $\tau_c$  одна из дислокаций, образующих стенку, начинает двигаться, удаляясь от границы (рис. 1c). Как показывает дальнейший расчет [9], освобождение единственной дислокации приводит к распаду всей границы в целом (рис. 1d). В результате группа решеточных дислокаций, освобожденных при распаде границы движется, вызывая локальную пластическую деформацию и образование удлиненного зерна. Согласно экспериментальным данным [7, 11], такие удлиненные зерна являются характерными структурными элементами полос сдвига в нанокристаллическом железе.

Следует обратить внимание, что распад границы превращает скомпенсированные тройные стыки в нескомпенсированные двойные (рис. 1d). Верхний и нижний стыки

становятся источниками напряжений дисклинационного типа, характеризующиеся дисклинационными мощностями  $-\omega = -\theta$  и  $\omega = \theta$ , соответственно. Поле напряжений дисклинационного диполя эффективно удерживает дислокации, т.е. выступает в качестве сдерживающей силы, препятствующей распаду.

Следуя [9], вычислим критическое напряжение сдвига  $\tau_c$  методами двухмерной дислокационной динамики. На каждую дислокацию в стенке действует сила со стороны дисклинационного диполя и со стороны других дислокаций. Найдем силы, действующие на каждую дислокацию, и запишем уравнения движения для всех дислокаций. Решение полученной системы дает набор временных зависимостей  $x_i(t)$ , где  $x_i$  – координата  $i$ -й дислокации ( $i=1,2,\dots,N$ ), а  $t$  – время. В модели [9] предполагается, что дислокации способны перемещаться только в плоскости скольжения (вдоль оси  $x$  в системе координат на рис. 1а), поэтому интерес представляет только проекция силы на ось  $x$ .

Сила, действующая на  $i$ -ю дислокацию в границе, записывается следующим образом:

$$F_i = b \left[ \tau + Db \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{(x_i - x_k) \{ (x_i - x_k)^2 - (y_i - y_k)^2 \}}{\{ (x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 \}^2} - D\omega \left( \frac{x_i y_i}{x_i^2 + y_i^2} - \frac{x_i (y_i - d)}{x_i^2 + (y_i - d)^2} \right) \right], \quad (2)$$

где  $D = G / [2\pi(1-\nu)]$ ,  $G$  – модуль сдвига,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $x_i$  и  $y_i = ih$  – координаты  $i$ -й дислокации,  $d$  – длина границы (расстояние между дисклинациями в тройных стыках, см. рис. 1). Первое слагаемое в формуле (2) учитывает силу, создаваемую внешним напряжением  $\tau$ , второе – описывает взаимодействие между дислокациями [12], а третье – взаимодействие дислокации с дисклинационным диполем [13].

Зная силы (2), можно записать систему уравнений движения для дислокаций, образующих границу наклона:

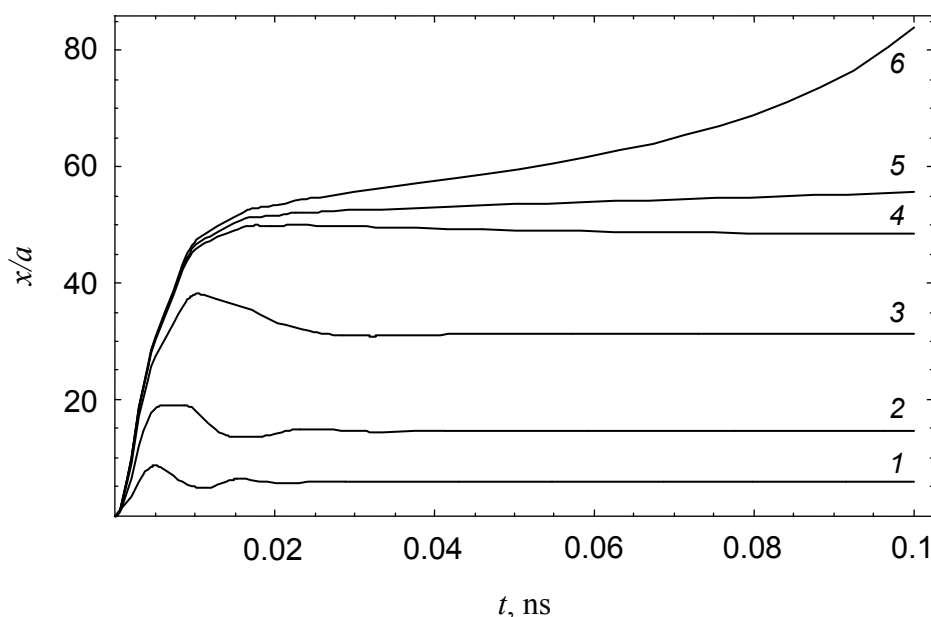
$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} + \beta \frac{dx_i}{dt} = F_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (3)$$

Первая производная  $dx_i / dt$  в этих уравнениях учитывает динамическое сопротивление решетки движению дислокаций,  $\beta$  – коэффициент вязкости. Для массы дислокаций  $m$  (на единицу длины) обычно используют оценку [14]  $m = \rho b^2 / 2$ , где  $\rho$  – плотность материала.

Следуя [9], решим систему (3) на примере железа. Для этого материала:  $G = 82$  ГПа,  $\nu = 0.29$ , параметр решетки  $a = 2.87$  Å, типичный вектор Бюргерса  $b = (1/2)a <111> = 0.25$  нм,  $\rho = 7800$  кг/м<sup>3</sup>,  $m = 2.4 \times 10^{-16}$  кг/м,  $\beta \approx 5 \times 10^{-5}$  Па·с [14]. Рассмотрим границу, состоящую из пятнадцати дислокаций ( $N=15$ ), с углом разориентировки  $\theta = 0.1 (\approx 5.7^\circ)$ , что дает  $\omega = 0.1$ ,  $h = 10b$ .

На рис. 2 представлена серия типичных зависимостей  $x(t)$ , построенных для 8-й (центральной) дислокации путем численного решения системы (3), при разных уровнях внешнего напряжения  $\tau$ . Для относительно низких напряжений (здесь  $\leq 1.53$  ГПа) дислокация после нескольких осцилляций стабилизируется в некоторой равновесной позиции, которая смещается все дальше и дальше по мере увеличения напряжения

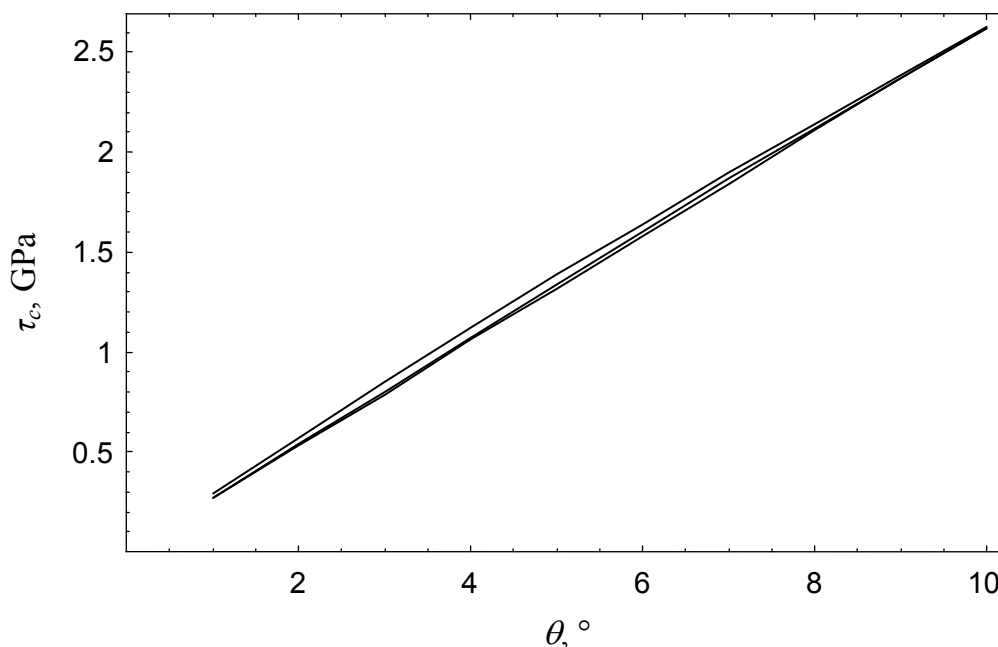
(кривые 1–4 на рис. 2). Когда величина напряжения превышает некоторое критическое значение  $\tau_c$  (здесь  $\tau_c = 1.53$  ГПа), дислокация удаляется от исходного положения на бесконечность (кривые 5 и 6 на рис. 2).



**Рис. 2.** Временные зависимости координаты  $x$  8-й дислокации в границе с разориентировкой  $\theta = 0.1$  рад и  $N = 15$  при разных значениях внешнего сдвигового напряжения:  $\tau = 0.5$  ГПа,  $\tau = 1.0$  ГПа,  $\tau = 1.4$  ГПа,  $\tau = 1.52$  ГПа,  $\tau = 1.53$  ГПа,  $\tau = 1.54$  ГПа (кривые 1, 2, 3, 4, 5, 6 соответственно).

Поступая подобным образом, можно исследовать устойчивость границы при разных значениях параметров задачи. На рис. 3 показана зависимость критического напряжения сдвига  $\tau_c$  от угла разориентировки  $\theta$  при разном количестве дислокаций ( $N = 5, 15, 30$ ). Зависимость  $\tau_c(\theta)$  имеет практически линейный характер, т.к. с ростом разориентировки пропорционально растет и мощность дисклинаций, а следовательно и возвращающие напряжения, создаваемые ими. В тоже время зависимость от количества дислокаций  $N$  (т.е., фактически, длины границы  $d(=Nh)$ ) очень слаба, так как кривые на рис. 3, соответствующие разным  $N$ , практически сливаются. Отсюда, в частности, следует, что очень короткие и сравнительно длинные границы распадаются при близких значениях критического напряжения  $\tau_c$ , если их углы разориентировки равны. В тоже время, в очень малых зернах действие источников Франка-Рида подавлено [15], что может делать распад малоугловых границ практически единственным источником мобильных дислокаций. В этих условиях критическое напряжение  $\tau_c$  является очень важной характеристикой, контролирующей пластическое течение нанокристаллических материалов. Напротив, в обычных крупнозернистых поликристаллических материалах, где источники Франка-Рида активируются при напряжениях ниже  $\tau_c$ , распад малоугловых границ не играет существенной роли в процессах пластической деформации. Критическое напряжение  $\tau_c$  распада границы характеризует начальную стадию пластической деформации и развития полос сдвига. Согласно расчетам [9] (рис. 3), величина  $\tau_c$  варьируется от 0.5 ГПа (для  $\theta \approx 2^\circ$ ) до 2.5 ГПа (для  $\theta \approx 10^\circ$ ). Ее

среднее значение  $\langle \tau_c \rangle = 1.5$  ГПа совпадает с экспериментально измеренной [7] величиной напряжения сдвига, при котором формируются полосы сдвига в нанокристаллическом Fe.

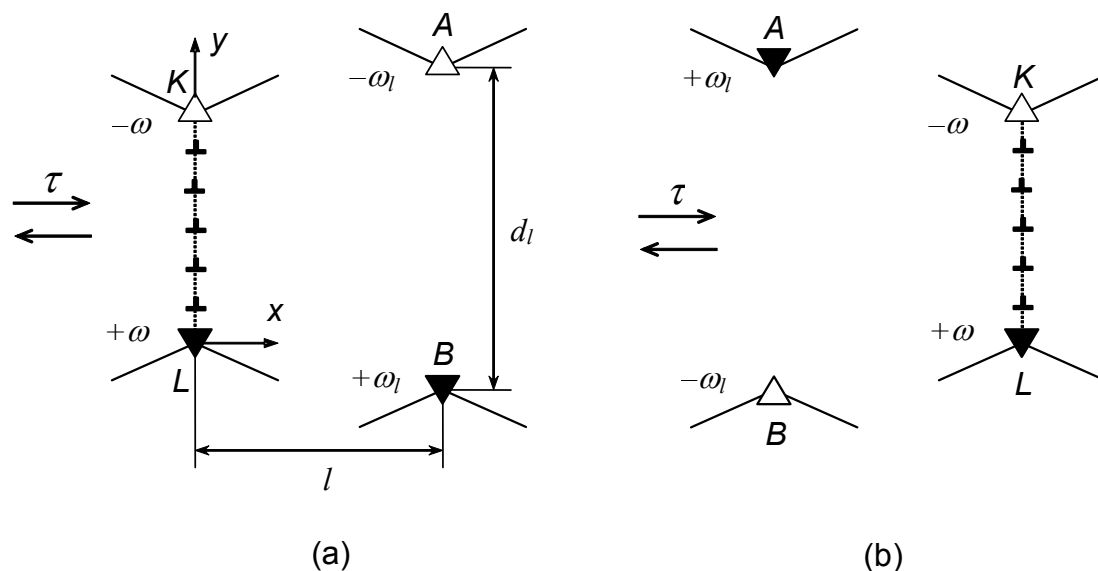


**Рис. 3.** Зависимость критического напряжения сдвига  $\tau_c$  от угла разориентировки границы для разного числа дислокаций в стенке:  $N = 5, 15, 30$  (сверху вниз).

Распад малоугловой границы в нагруженном нанокристаллическом образце приводит к образованию подвижных решеточных дислокаций, которые могут приближаться к соседним границам зерен и упруго взаимодействовать с решеточными дислокациями, образующими эти границы. Это взаимодействие способно привести к распаду соседних границ зерен с лавинообразным образованием мобильных решеточных дислокаций. Следуя [9], рассмотрим и этот процесс.

После распада малоугловая граница преобразуется в источник напряжений, моделируемый дисклинационным диполем. В тройных стыках границ образуются две клиновые дисклинации противоположного знака  $\pm\omega_l$  после того как дислокации удалятся от исходной плоскости границы (рис. 4). Дисклинационный диполь упруго взаимодействует с дефектами, расположенными по соседству с ним. В частности, диполь либо притягивает, либо отталкивает решеточные дислокации, образующие соседние малоугловые границы зерен, в зависимости от геометрии системы. Это упругое взаимодействие, очевидно, оказывает влияние на процесс распада соседней малоугловой границы. На рис. 4 изображены основные варианты расположения распавшейся границы АВ, представляемой в виде диполя дисклинаций с мощностями  $\pm\omega_l$  с плечом  $d_l$ , относительно пробной малоугловой границы KL. В конфигурациях на рис. 4 дислокации, образовавшиеся при распаде границы АВ, двигаются в направлении от границы KL (удаляются от нее), т.е. в процессе распада границы KL не участвуют. В случае, изображенном на рис. 4а, дисклинационный диполь АВ притягивает решеточные дислокации границы KL, тем самым облегчая ее распад, т.е. критическое

напряжение распада  $\tau_c$  понижается. Точно также оно понижается и в случае на рис. 4b. Здесь диполь АВ отталкивает дислокации, однако, т.к. он в этом случае расположен по другую сторону от границы KL, его поле напряжений вновь облегчает распад соседней границы.



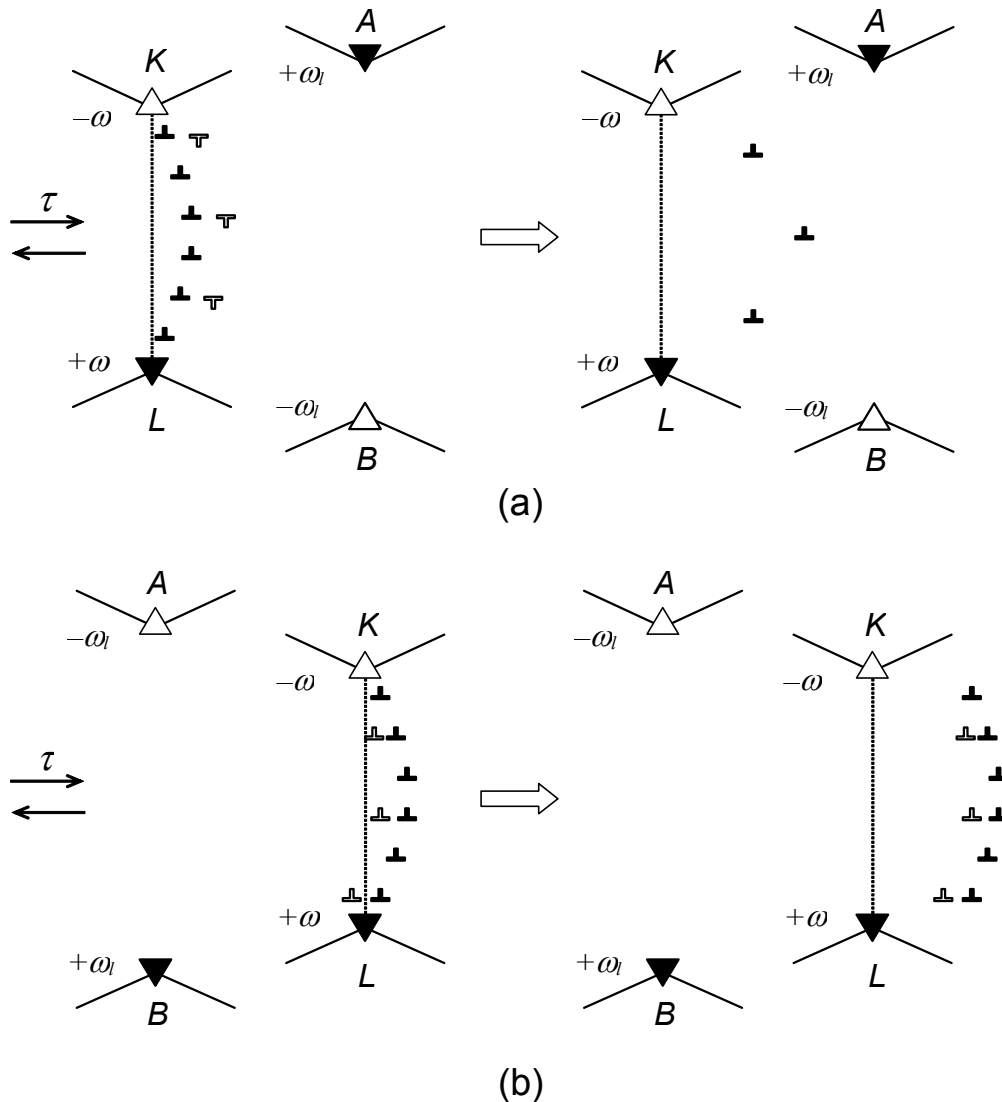
**Рис. 4.** Две малоугловые границы, граница KL и распавшаяся граница АВ, под действием сдвигового напряжения. Дислокации в стыках границ А и В создают поля напряжений, облегчающие распад границы KL. Два варианта расположения границ изображены на (a) и (b). Reprinted from [9]. Copyright 2004, with permission from Elsevier.

Принципиально иные конфигурации показаны на рис. 5. Здесь дислокации из распавшейся границы АВ двигаются по направлению к границе KL и должны принимать активное участие в процессе ее распада. На рис. 5a показано к чему приводит взаимодействие дислокаций из обеих границ в случае, когда дислокации обеих границ имеют противоположный знак. Очевидно, что должна иметь место взаимная аннигиляция части дислокаций, что приведет к уменьшению плотности дислокаций в пробной границе KL, т.е. к уменьшению угла ее разориентировки ( $\omega' < \omega$ ), и, как следствие, уменьшению критического напряжения  $\tau_c$ . Следует учитывать тот факт, что имеет смысл рассматривать только конфигурации с  $\omega_l < \omega$ , т.к. напряжение, разрушившее границу с углом разориентировки  $\theta = \omega_l$ , и подавно разрушило бы границу с меньшим углом разориентировки. Таким образом, количество дислокаций из распавшейся границы АВ меньше, чем количество дислокаций в границе KL, и полная аннигиляция границы KL невозможна.

Аналогично, на рис. 5b изображено взаимодействие дислокаций обеих границ в случае, когда они имеют одинаковый знак. Очевидно, дислокации распада упрутся в границу KL, как минимум, увеличивая ее прогиб, а как максимум могут ее вообще разрушить при достаточном их количестве ( $\omega_l \approx \omega$ ). В любом случае, и здесь можно сделать вывод, что дислокации распада приводят к уменьшению критического напряжения  $\tau_c$ . Таким образом, мы можем сделать вывод, что, в общем случае, разрушение малоугловой границы зерна должно приводить к уменьшению критического напряжения распада соседних с ней границ.



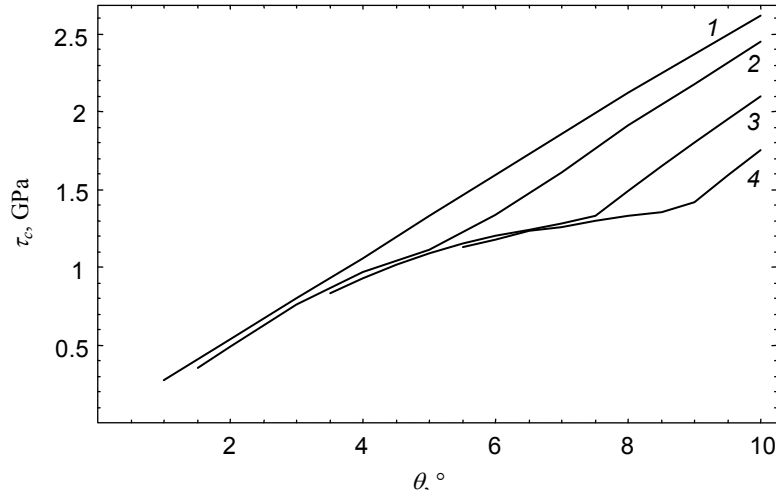
Перейдем теперь от качественного рассмотрения к количественному. Детально исследуем конфигурацию, изображенную на рис. 4а. Поместим на расстоянии  $l$  от дислокационной стенки, состоящей из  $N$  решеточных дислокаций, дисклинационный



**Рис. 5.** Движение решеточных дислокаций (белые значки), освобожденных в результате распада границы АВ по направлению к границе KL в случаях, когда подвижные и неподвижные дислокации имеют вектора Бюргерса (а) противоположных знаков и (б) одного знака. Reprinted from [9]. Copyright 2004, with permission from Elsevier.

диполь с плечом  $d_l$ , образованный дисклинациями с мощностями  $\pm\omega_l$  (рис. 4а). Для описания поведения решеточных дислокаций, образующих границу KL, используем подход, использованный выше для распада одиночной малоугловой границы. Очевидно, в рамках предложенной модели схема рассуждений сохраняется. Единственное изменение претерпевает сила  $F_i$  (2), действующая на  $i$ -ю дислокацию в стенке. Добавив в формулу (2) напряжение диполя дисклинаций АВ, мы получаем следующее выражение для силы:

$$F_i = b \left[ \tau + Db \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{(x_i - x_k) \{ (x_i - x_k)^2 - (y_i - y_k)^2 \}}{\{ (x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 \}^2} - D\omega \left( \frac{x_i y_i}{x_i^2 + y_i^2} - \frac{x_i (y_i - d)}{x_i^2 + (y_i - d)^2} \right) \right. \\ \left. - D\omega_l \left( \frac{(x_i - l)(y_i + d_l/2 - d/2)}{(x_i - l)^2 + (y_i + d_l/2 - d/2)^2} - \frac{(x_i - l)(y_i - d_l/2 - d/2)}{(x_i - l)^2 + (y_i - d_l/2 - d/2)^2} \right) \right]. \quad (4)$$



**Рис. 6.** Зависимости критического напряжения сдвига  $\tau_c$  малоугловой границы KL, находящейся в поле напряжений разрушенной границы АВ, от угла разориентировки  $\theta$  при разных значениях параметра  $\omega_l$ :  
 $\omega_l = 0^\circ, 1^\circ, 3^\circ, 5^\circ$  (кривые 1, 2, 3, 4, соответственно).

Используя те же значения параметров, что и выше решим систему (3) с правой частью, определяемой выражением (4), для разных значений параметров  $\omega_l$ ,  $d_l$  и  $l$ . На рис. 6 представлены результаты решения для случая, где дисклинационный диполь помещался на фиксированном расстоянии  $l = 50$  нм и  $d_l = d$ . Верхняя кривая на рис. 6 соответствует зависимости  $\tau_c(\theta)$  при отсутствии дисклинационного диполя ( $\omega_l = 0$ ). Далее сверху вниз следуют кривые, показывающие, как изменяется зависимость  $\tau_c(\theta)$  для значений  $\omega_l$  равных  $1^\circ$ ,  $3^\circ$  и  $5^\circ$ , соответственно (эти кривые построены в диапазоне  $\omega_l \leq \theta \leq 10^\circ$ , т.к. для углов  $\theta < \omega_l$  эта зависимость не имеет смысла - напряжение, разрушившее границу с углом разориентировки  $\theta = \omega_l$ , и подавно разрушило бы границу с меньшим углом разориентировки). Как видно из рис. 6, критическое напряжение понижается, причем это снижение может быть довольно значительным при определенных значениях параметров  $\theta$  и  $\omega_l$ . Например, при  $\theta = 8.5^\circ$  и  $\omega_l = 5^\circ$  критическое напряжение  $\tau_c$  понижается приблизительно на 40 %.

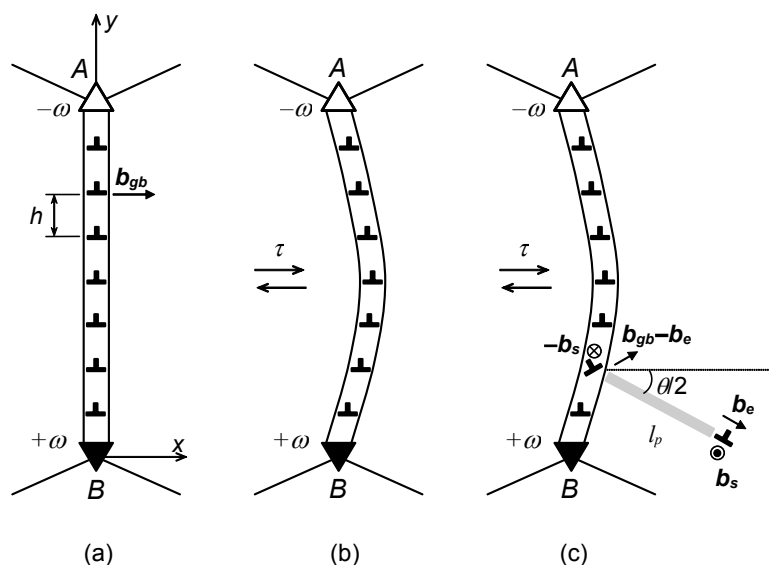
Таким образом, можно сделать вывод, что поле напряжений распавшейся малоугловой границы наклона, моделируемое дисклинационным диполем (рис. 4), сильно воздействует на соседнюю малоугловую границу. В некоторых случаях это влияние значительно облегчает распад малоугловой границы. Этот эффект способствует локализации пластического течения в деформированных нанокристаллических материалах, содержащих большие ансамбли малоугловых

границ.

Следуя [9], рассмотрим теперь большеугловые границы зерен в деформируемых нанокристаллических материалах. В общем случае большеугловые границы содержат дислокации, связанные с ориентационным несоответствием границы и характеризующиеся малыми векторами Бюргерса [10]. Такие дислокации не могут свободно скользить в кристаллической решетке зерна, в отличие от решеточных дислокаций, образующих малоугловые границы. Поэтому распад большеугловых границ под действием внешнего напряжения невозможен. Однако, в экспериментах с механически нагруженными нанокристаллическими материалами показано, что большеугловые границы способны прогибаться [16, 17] и испускать частичные дислокации [17–20], которые переносят двойниковую деформацию. Для объяснения этих экспериментальных фактов, авторы [9] распространили теоретическую модель, описывающую эволюцию малоугловых границ наклона, на случай большеугловых границ, состоящих из зернограницных дислокаций.

В общем случае большеугловые границы содержат дислокации, связанные с ориентационным несоответствием границы и характеризующиеся малыми векторами Бюргерса [10]. Такие дислокации не могут свободно скользить в кристаллической решетке зерна, в отличие от решеточных дислокаций, образующих малоугловые границы, поэтому распад большеугловых границ под действием внешнего напряжения невозможен. В тоже время, согласно экспериментальным данным [16–20], высокоугловые границы способны прогибаться и испускать частичные дислокации в тело соседних зерен.

В рамках модели [9] ее авторы описали эволюцию большеугловой границы зерна в поле сдвиговых напряжений в два этапа (рис. 7). На первом этапе изначально прямая граница (рис. 7a) под действием внешней нагрузки прогибается как целое (рис. 7b).



**Рис. 7.** Модель большеугловой границы наклона. (a) Исходное состояние; (b) прогиб границы под действием внешнего сдвигового напряжения  $\tau$ ; (c) испускание дислокации Шокли с образованием дефекта упаковки и разностной дислокации на месте исходной зернограницной. Reprinted from [9]. Copyright 2004, with permission from Elsevier.

Этот этап описывался с помощью уравнений (3) подобно описанию движения дислокаций в малоугловой границе наклона. Движение большеугловой границы является своего рода миграцией, вызываемой внешними напряжениями, приводящей к

увеличению длины границы, что приводит к увеличению ее поверхностной энергии  $\Delta W_{gb}$ , что, в свою очередь, создает силу  $F_{gb}$ , препятствующую дальнейшему прогибу.

Существенным отличием модели большеугловой границы наклона от малоугловой является тот факт, что угол разориентировки  $\theta$  границы связан с параметрами дислокационной структуры отличной от соотношения Франка формулой:

$$\sin\left(\frac{\theta - \theta_0}{2}\right) = b_{gb} / 2h \quad (5)$$

где  $b_{gb}$  – вектор Бюргерса зернограницной дислокации,  $\theta_0$  – угол разориентировки, соответствующий особым низкоэнергетическим (бездислокационным) конфигурациям границы (например, когерентная двойниковая граница). Таким образом, зернограницная дислокационная структура определяет не угол разориентировки, а его отклонение от  $\theta_0$ .

В процессе прогиба высокоугловой границы смещение зернограницных дислокаций вызывает перераспределение их полей напряжений. На это перераспределение сильное влияние оказывает баланс разориентаций в тройных стыках границ зерен. Подобно малоугловым границам наклона, описанным выше, тройные стыки изначально предполагаются скомпенсированными. Т.е. стыки А и В играют роль источников напряжений, компенсирующих поле напряжений конечной дислокационной стенки, состоящей из зернограницных дислокаций с вектором Бюргерса  $b_{gb}$ . Следовательно стыки А и В, примыкающие к высокоугловой границе, зернограницные дислокации которой вносят вклад  $\theta - \theta_0$  в разориентировку, описываются как дисклинации, полностью компенсирующие поле стенки. Согласно формуле (5), компенсирующие дисклинации в стыках А и В имеют мощности  $\omega = \theta - \theta_0$  и  $-(\theta - \theta_0)$ , соответственно.

С учетом проведенного выше анализа геометрии высокоугловой границы зерна и ее дислокаций, авторы [9] описали прогиб границы как процесс, связанный с движением зернограницных дислокаций под действием внешнего напряжения сдвига, используя ту же схему движения, которую они использовали при описании малоугловых границ (см. выше). При этом используются уравнения движения (3), где сила  $F_i$  записывается в следующем виде:

$$F_i = b_{gb} \left[ \tau + Db_{gb} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{(x_i - x_k) \{ (x_i - x_k)^2 - (y_i - y_k)^2 \}}{\{ (x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 \}^2} - \right. \\ \left. - D\omega \left( \frac{x_i y_i}{x_i^2 + y_i^2} - \frac{x_i (y_i - d)}{x_i^2 + (y_i - d)^2} \right) \right] - F_i^{gb}. \quad (6)$$

Здесь  $F_i^{gb}$  сила торможения, действующая на  $i$ -ю дислокацию из-за увеличения длины и, следовательно, энергии  $\Delta W_{gb}$  границы. Увеличение энергии границы  $\Delta W_{gb}$  записывается как:  $\Delta W_{gb} = \gamma_{gb} \Delta l_{gb}$ , где  $\gamma_{gb}$  – плотность поверхностной энергии границы, а  $\Delta l_{gb} = l_{gb} - d$  изменение длины границы в результате изгиба ( $d$  – исходная длина,  $l_{gb}$  – конечная). Границу в искривленном состоянии (рис. 7b) можно аппроксимировать

ломаной линией, соединяющей зернограницные дислокации. Тогда длину изогнутой границы можно записать:  $l_{gb} \approx \sum_{k=1}^{N+1} \sqrt{(x_k - x_{k-1})^2 + h^2}$ , где  $x_0 = x_{N+1} = 0$ . Используя эту формулу и выражение для  $\Delta W_{gb}$ , тормозящая сила  $F_i^{gb}$  записывается в виде:

$$F_i^{gb} = \frac{d(\Delta W_{gb})}{dx_i} = \frac{d}{dx_i} \left[ \gamma_{gb} \left( \sum_{k=1}^{N+1} \sqrt{(x_k - x_{k-1})^2 + h^2} - d \right) \right] =$$

$$= \gamma_{gb} \left( \frac{x_i - x_{i-1}}{\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + h^2}} + \frac{x_i - x_{i+1}}{\sqrt{(x_i - x_{i+1})^2 + h^2}} \right). \quad (7)$$

Решение системы (3) с силой, задаваемой формулами (6) и (7), позволяет найти новые равновесные положения  $\{x_0, y_0\}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) зернограницных дислокаций, т.е. конфигурацию большеугловой границы в прогнутом состоянии (рис. 7b). Эта конфигурация характеризуется максимальным прогибом  $x_{max}$  – расстоянием между центральной точкой прогнутой границы и исходной ее плоскостью. Зависимости  $x_{max}$  от дисклинационной мощности  $\omega$  и длины границы  $d$  представлены на рис. 8а и 8b соответственно. Из рисунков хорошо видно, что зависимости близки к линейным.

Теперь, вслед за авторами [9], рассмотрим процесс испускания частичных дислокаций из границы зерна. Предположим, что под действием внешнего напряжения одна из зернограницных дислокаций в границе испускает дислокацию Шокли (краевую компоненту которой будем обозначать  $b_e$ , а винтовую –  $b_s$ ), которая при движении оставляет за собой дефект упаковки длиной  $l_p$  (рис. 7с). Энергию дефекта упаковки обозначим  $\gamma$ . На месте исходной зернограницной дислокации после испускания дислокации Шокли остается разностная дислокация с краевой компонентой  $b_{gb} - b_e$  и винтовой  $-b_s$ .

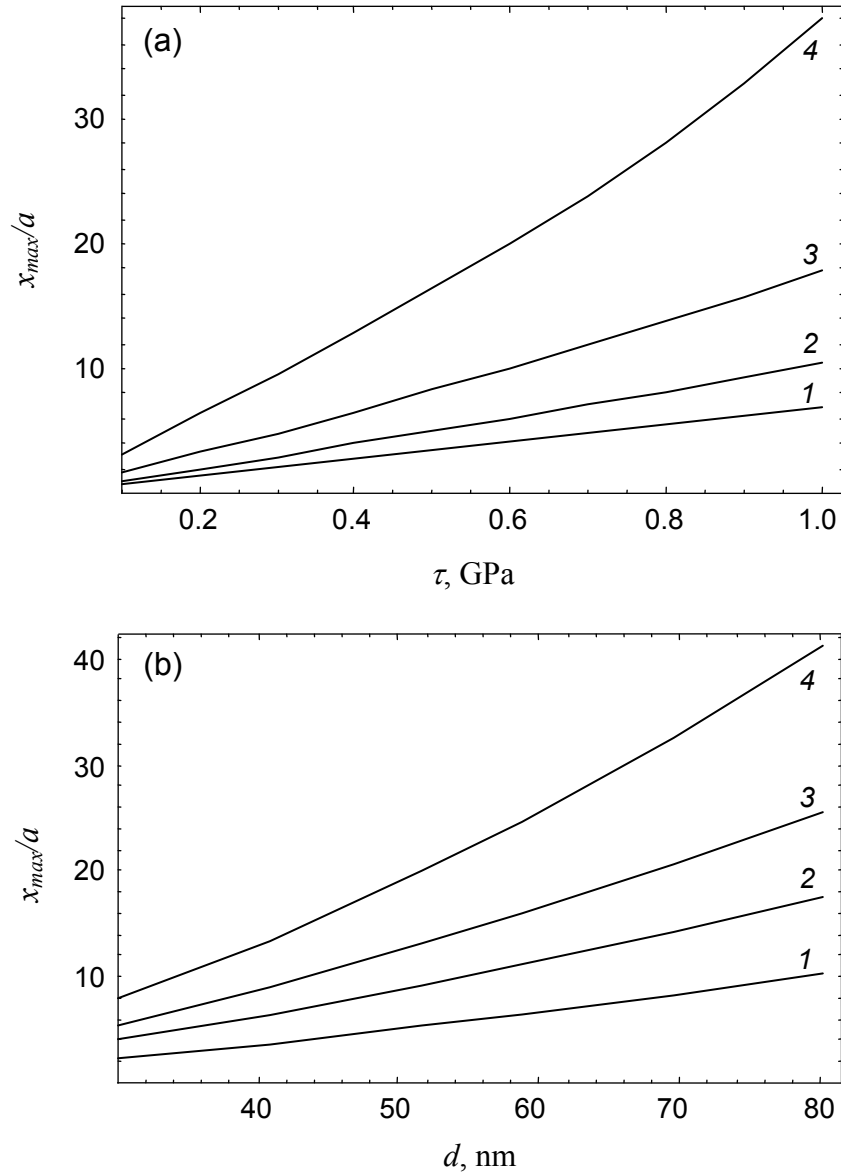
На данном этапе учтем также дополнительный фактор, который до сих пор игнорировался: в модели малоугловой границы считалось, что дислокации двигаются по плоскостям, перпендикулярным плоскости границы, хотя на самом деле из-за разориентации эти плоскости поворачиваются на угол  $\theta/2$ . В случае малоугловых границ в силу малости угла  $\theta$  данным фактом можно было пренебрегать, чего нельзя делать в случае больших разориентировок. Поэтому далее будем считать, что дислокации Шокли двигаются по плоскостям, составляющим угол  $\theta/2$  с нормалью к плоскости границы (см. рис. 7с).

В работе [9] было рассчитано изменение упругой энергии  $\Delta W$  при трансформации системы из начального состояния (рис. 7b) в конечное (рис. 7с). Опуская промежуточные расчеты, приведем окончательный результат: Испускание дислокации выгодно, если изменение энергии

$$\Delta W = \frac{D}{2} \left[ b_e^2 \left( 2 \ln \frac{l_p - b_e}{b_e} + 1 \right) + 2(1 - \nu) b_s^2 \left( \ln \frac{l_p - b_s}{b_s} + 1 \right) - b_{gb}^2 + b_{dif}^2 \right] +$$

$$+ b_e \int_{b_e}^{l_p} \left[ \sigma_{x'y'}^{\omega}(x', y' = 0) + \sigma_{x'y'}^{gb}(x', y' = 0) \right] dx' + \gamma l_p - \tau_{x'y'} b_e l_p. \quad (8)$$

отрицательно ( $\Delta W < 0$ ). Здесь  $b_{dif} = \sqrt{(b_{gb} - b_e \cos \theta / 2)^2 + b_e^2 \sin^2 \theta / 2}$  – модуль вектора Бюргера разностной дислокации, образующейся при расщеплении на месте исходной зернограницной дислокации;  $\sigma_{x'y'}^{\omega}$  и  $\sigma_{x'y'}^{gb}$  – компоненты тензоров напряжений дисклинационного диполя и стенки зернограницных дислокаций, записанные в системе координат  $Ox'y'$  (рис. 9), связанной с расщепляемой зернограницной дислокацией.



**Рис. 8.** Зависимости максимального прогиба границы  $x_{max}$  от различных параметров задачи. (а) Зависимости  $x_{max}$  от внешнего напряжения  $\tau$  при разных значениях  $\omega = 4^\circ, 6^\circ, 8^\circ, 10^\circ$  (кривые 1, 2, 3, 4, соответственно) при фиксированном количестве дислокаций  $N = 20$ ; (б) Зависимости  $x_{max}$  от длины границы  $d$  (размера зерна) при разных значениях  $\tau = 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$  ГПа (кривые 1, 2, 3, 4, соответственно) при фиксированном значении  $\omega = 4^\circ$  (количество дислокаций в границе изменялось в зависимости от величины  $d$ ).

Преобразование компонент тензоров при переходе от системы координат  $Oxy$  (рис. 7)

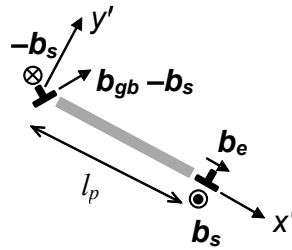
к системе  $Ox'y'$  осуществляется по стандартным формулам:

$$\sigma_{x'y'}(x', y') = \sigma_{xy}(x, y) \cos \theta - \frac{\sin \theta}{2} (\sigma_{yy}(x, y) - \sigma_{xx}(x, y)) \quad (9)$$

где

$$x = x' \cos \theta / 2 - y' \sin \theta / 2 + x_d, \quad y = -x' \sin \theta / 2 + y' \cos \theta / 2 + y_d.$$

Здесь  $x_d$  и  $y_d$  – координаты расщепляемой зернограницной дислокации; они определяются на этапе решения задачи о прогибе высокоугловой границе. Вычисление интеграла в правой части формулы (8) не представляет никаких сложностей, однако результат настолько громоздок, что здесь мы его не приводим.



**Рис. 9.** Расщепленная дислокационная структура, состоящая из дислокации Шокли, дефекта упаковки и разностной дислокации.

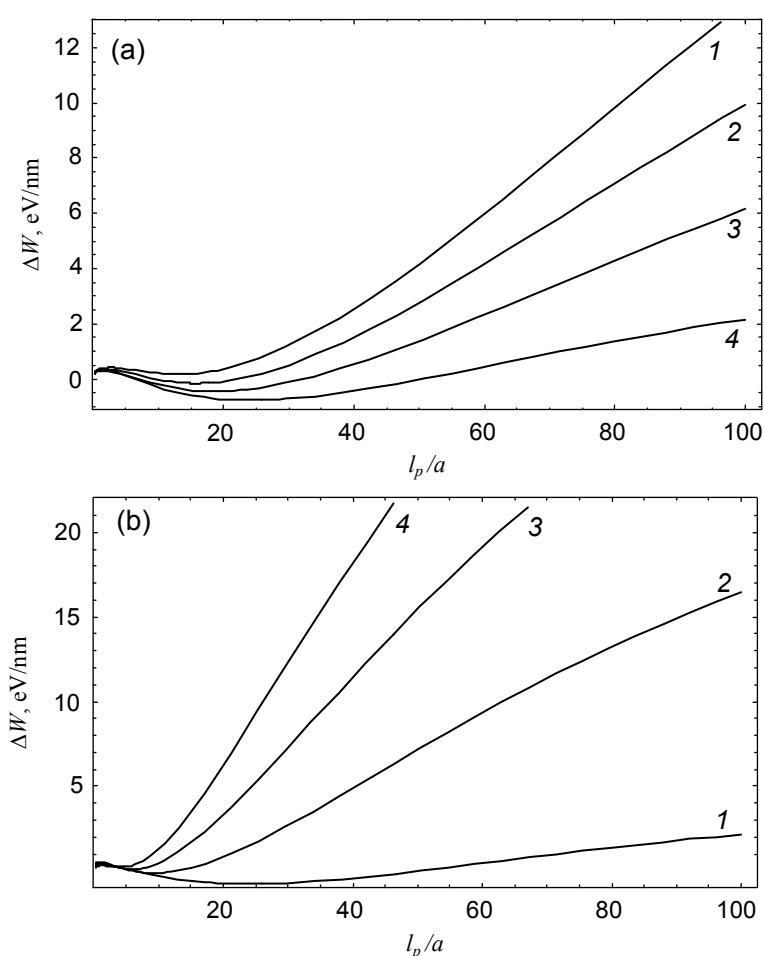
Выполним расчет разности энергий  $\Delta W$  (8) на примере чистой меди. Для этого материала:  $G = 48$  ГПа,  $\nu = 0.34$ , параметр решетки  $a = 3.6$  Å, типичный вектор Бюргерса  $\frac{1}{2}a <110>$ , что дает  $b = 2.55$  Å,  $\rho = 8920$  кг/м<sup>3</sup>,  $m = 2.9 \times 10^{-16}$  кг/м,  $\beta \approx 5 \times 10^{-5}$  Па·с,  $\gamma = 0.06$  Дж/м<sup>2</sup>. Вектор Бюргерса зернограницной дислокации положим равным  $b_{gb} = b/2$ , для дислокации Шокли в ГЦК решетке компоненты  $b_s$  и  $b_e$  равны, соответственно,  $a/(2\sqrt{6})$  и  $b/2$ . Энергия границы зерна  $\gamma_{gb}$  зависит от  $\theta_0$ . Для границы типа  $\Sigma = 5/(210)$  с углом  $\theta_0 = 36.87^\circ$  энергия равна  $\gamma_{gb} = 0.9$  Дж/м<sup>2</sup> [21]. В целом, для меди эта энергия варьируется в диапазоне 0.7–1 Дж/м<sup>2</sup>.

На рис. 10а изображены зависимости  $\Delta W(l_p)$ , соответствующие разным уровням внешнего напряжения:  $\tau = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$  ГПа ( $\omega = 3^\circ$ ,  $N = 20$ ,  $\gamma_{gb} = 0.9$  Дж/м<sup>2</sup>). Как и следовало ожидать, более высокое напряжение облегчает расщепление, тогда как при низких напряжениях расщепление вообще невыгодно.

Аналогично, зависимость  $\Delta W(l_p)$  чувствительна к параметрам дислокационной структуры границы зерна, а именно к величине  $\omega$ , т.е. вкладу зернограницных дислокаций в общий угол разориентировки границы. На рис. 10b приведены кривые, соответствующие значениям  $\omega = 3^\circ, 5^\circ, 7^\circ, 9^\circ$  ( $\tau = 1$  ГПа,  $N = 20$ ,  $\gamma_{gb} = 0.9$  Дж/м<sup>2</sup>). Вполне закономерно увеличение угла разориентировки приводит к затруднению испускания частичных дислокаций.

Таким образом, процессы прогиба и испускания частичных дислокаций в высокоугловых границах наклона под действием внешнего напряжения сдвига (рис. 7) сильно чувствительны к внешнему напряжению  $\tau$  и параметру  $\omega$ , характеризующему

ансамбль зернограницных дислокаций (рис. 10). Результаты теоретической модели [9] объясняют экспериментальные наблюдения прогнутых границ [16, 17] и испускание частичных дислокаций [17–20] в деформируемых нанокристаллических металлах. Эти результаты свидетельствуют о важной роли зернограницных дислокаций в трансформациях большеугловых границ. В нанокристаллических металлах, где границы зерен выступают исключительно эффективными препятствиями движению решеточных дислокаций, а действие обычных дислокационных источников подавлено, уровень внешних напряжений оказывается достаточно высоким, для активации движения и/или расщепления зернограницных дислокаций в большеугловых границах зерен. В результате, высокоугловые границы подвергаются специфическим трансформациям, способным существенным образом модифицировать действие механизмов деформации и разрушения (исключительно чувствительным к структурной геометрии границ зерен [22–24]) в нанокристаллических материалах.



**Рис. 10.** (а) Зависимости изменения энергии  $\Delta W$  от длины расщепления  $l_p$  для разных значений величины внешнего напряжения:  $\tau = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$  ГПа (кривые 1, 2, 3, 4, соответственно). Значения других параметров:  $\omega = 3^\circ$ ,  $N = 20$ . (б) Зависимости изменения энергии  $\Delta W$  от длины расщепления  $l_p$  для разных значений мощности дисклинационного диполя:  $\omega = 3^\circ, 5^\circ, 7^\circ, 9^\circ$  (кривые 1, 2, 3, 4, соответственно). Значения других параметров:  $\tau = 1$  ГПа,  $N = 20$ .



Все рассмотренные выше модели являются двухмерными, поэтому нередко поднимается вопрос об их применимости к реальным трехмерным образцам. Ниже мы рассмотрим несколько трехмерных моделей, предложенных для объяснения разнообразных эффектов, возникающих при пластической деформации нанокристаллических материалов.

Одним из примеров таких эффектов является экспериментально установленный факт, что дефекты упаковки, образующиеся между частичными дислокациями в нанокристаллическом Al, в 1.5–11 раз шире, чем в обычных крупнозернистых образцах [25]. Эти наблюдения нарушают устоявшееся мнение о том, что расщепление дислокаций и двойникование в чистом Al практически невозможны из-за высокой энергии дефекта упаковки [26]. По свидетельству авторов [18, 27], появление частичных дислокаций Шокли в чистом крупнозернистом Al наблюдалось до сих пор только у вершин трещин [28].

Чтобы понять причины расщепления дислокаций и аномального уширения дефектов упаковки в нанокристаллическом Al, было предложено несколько теоретических моделей [25, 27, 29, 30], описывающих изменение энергии системы в процессе испускания полупетель частичных дислокаций (ППЧД) границами нанозерен. Общим итогом этих моделей стал вывод о том, что главной причиной является малый размер зерна – по мере его уменьшения становится все более энергетически выгодным уширение дефекта упаковки между последовательно испущенными ППЧД. В то же время, общим недостатком моделей [25, 27, 29, 30] был чрезмерно упрощенный метод расчета энергии ППЧД, а также отсутствие учета реальной геометрии их скольжения. В частности, рассматривались полупетли, которые фактически обрывались в упругой среде, не замыкаясь на другие дефекты, хотя на словах предполагалось, что эти обрывы дислокационных линий располагаются на границе зерен. Собственные энергии полупетель рассчитывались как суммы собственных энергий составляющих их отрезков, для вычисления которых использовались погонные упругие энергии бесконечных прямолинейных дислокаций в бесконечной упругой среде с выбором размера зерна в качестве радиуса экранировки. Такой выбор радиуса экранировки обеспечивал грубый учет упругого взаимодействия между отрезками одной полупетли, но взаимодействием между полупетлями при этом пренебрегали. Также использовалось ничем не обоснованное предположение о закреплении и неподвижности первой испущенной ППЧД в процессе испускания второй. В целом такое приближение представляется слишком грубым даже для получения сколь угодно надежных качественных результатов, не говоря уже о количественных оценках.

В работах [31, 32] была построена более корректная трехмерная модель эмиссии границами зерен полупетель скользящих расщепленных дислокаций в нанокристаллическом Al, основанная на точном расчете энергии упруго взаимодействующих дислокационных петель с учетом реальной геометрии их скольжения. Остановимся на модели [32] более подробно.

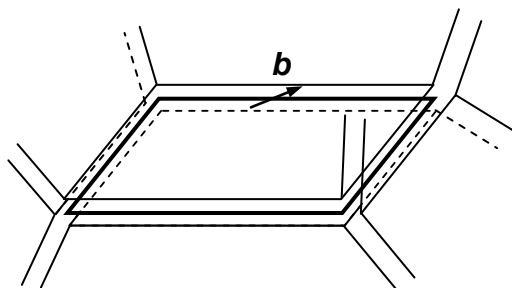
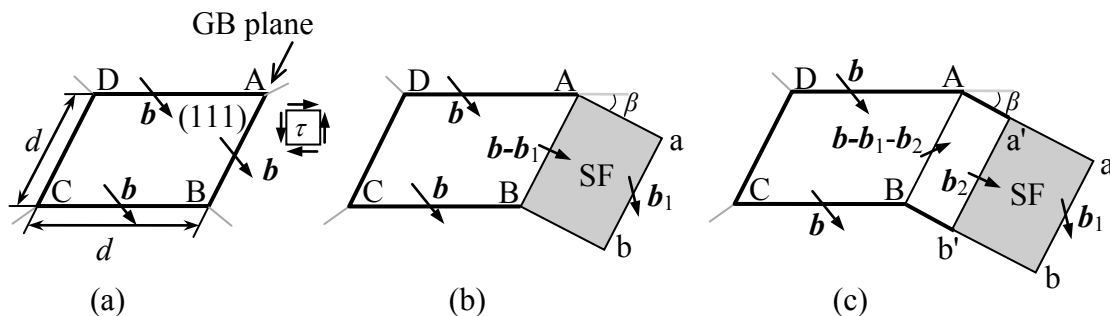


Рис. 11. Дислокационная петля в границе зерна.

Следуя [32], рассмотрим модель последовательной эмиссии двух ППЧД границей зерна в нанокристаллическом Al с образованием полос дефектов упаковки между испущенными ППЧД. В исходном состоянии система представляет собой дислокационную петлю с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , которая охватывает зерно целиком, залегающая вдоль его границы (рис. 11). Для простоты предполагается, что зерно и петля имеют квадратную форму. Петля может представлять собой элемент дислокационной структуры границы зерна (при этом быть решеточной в случае малоугловой границы или зернограницной в случае большеугловой) или возникать в процессе межзеренного проскальзывания.

Генерация ППЧД схематично показана на рис. 12. Под действием внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  на одном из отрезков исходной петли (рис. 12а) происходит последовательное зарождение двух ППЧД с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$ , распространяющихся в соседнее зерно. Исходная и испускаемые петли лежат в плоскостях разориентированных на угол  $\beta$ . На участке между ППЧД образуется дефект упаковки – серая область на рис. 12b,c. Вектор Бюргерса  $\mathbf{b}_0 = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ ; этот случай является одним из наиболее благоприятных для зарождения ППЧД и соответствует испусканию петли расщепленной полной дислокации. Комбинация величин  $\mathbf{b}_0$ ,  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$ , а также плоскости залегания петель определяют действующую систему скольжения.

В работах [31, 32] были рассмотрены три типичные для ГЦК металлов системы скольжения: в первых двух ППЧД зарождаются на отрезке  $60^\circ$  дислокации (причем в первой сначала испускается краевой отрезок дислокации, а потом  $30^\circ$ , а во второй – наоборот), а в третьей системе зарождение происходит на винтовом отрезке исходной петли зарождаются два отрезка  $30^\circ$  дислокаций. Авторы [31,32] называли их, соответственно, системами  $60^\circ$ -I,  $60^\circ$ -II и винтовой.

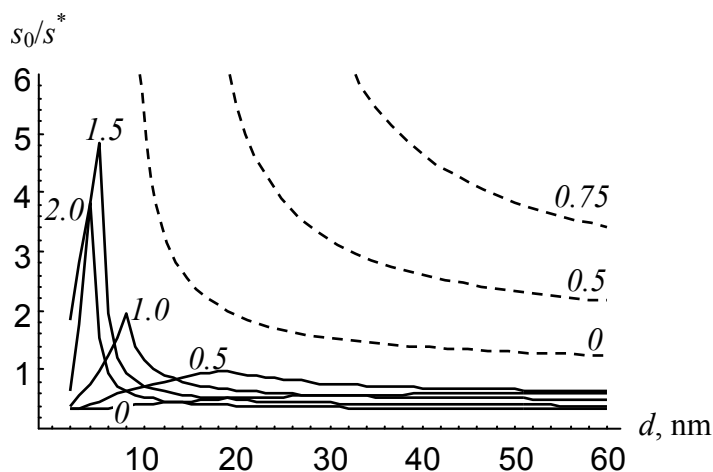


**Рис. 12.** Модель зарождения полупетель частичных дислокаций с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  на исходной петле решеточной дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ : (а) исходная петля, залегающая вдоль границы зерна; (б) зарождение первой полупетли частичной дислокации AabB на отрезке АВ исходной петли; (с) зарождение второй полупетли частичной дислокации Aa'b'B на отрезке АВ исходной петли.

Авторы [32] рассчитали энергетические параметры системы, изображенной на рис. 12, для всех вариантов систем скольжения, определили критические напряжения для зарождения каждой из ППЧД и рассчитали равновесную ширину дефекта упаковки в зависимости от размера зерна в нанокристаллическом Al. Последний результат показан на рис. 13 в виде зависимостей  $s_0(d)/s^*$  для системы  $60^\circ$ -I, где  $s_0$  – равновесная ширина дефекта упаковки в нанокристаллическом Al (длина отрезка aa' на рис. 12с), а  $s^*$  равновесная ширина дефекта упаковки между прямолинейными частичными дислокациями в бесконечной среде (для Al  $s^* \approx 0.7$  nm). Сплошные

кривые рассчитаны для разных значений приложенного напряжения (уровень напряжения в ГПа указан возле кривых). Для сравнения пунктирными линиями показаны аналогичные результаты, полученные в упрощенной модели [29]. Видно, что первые совершенно отличаются от вторых. Главное отличие состоит в том, что для всех трех систем скольжения в отсутствие внешнего напряжения ( $\tau = 0$ ) дефект упаковки в настоящей модели оказывается уже, чем в бесконечной среде:  $s_0/s^* < 1$ , тогда как предыдущие теоретические модели [25, 27, 29, 30] дают противоположный результат.

В итоге авторы [31, 32] делают следующий вывод: аномальная ширина дефектов упаковки в нанокристаллическом Al объясняется исключительно действием внешнего напряжения. Результаты предыдущих моделей [25, 27, 29, 30], которые объясняли аномальную ширину дефекта упаковки еще и размерным эффектом (в отсутствие внешнего напряжения) верны только при строгом выполнении условия неподвижности первой ППЧД. В общем же случае размерный эффект является отрицательным, т. е. с уменьшением размера зерна ширина дефекта упаковки должна падать. Вероятнее всего, широкие дефекты упаковки формируются под действием сильных внутренних напряжений ( $>1$  ГПа), возникающих в процессе изготовления или локального нагружения нанокристаллического Al. Уширение дефекта упаковки, сопоставимое с наблюдавшимся на эксперименте [25], возможно при очень высоких значениях упругих напряжений, формирующихся либо на стадии изготовления нанокристаллических образцов путем интенсивной пластической деформации (как при криогенном размоле порошка Al в шаровых мельницах), либо при сильно неоднородном механическом нагружении наноматериала (как при наноиндентировании тонких нанокристаллических пленок). При этом нанокристаллическое состояние чистого Al обеспечивает отсутствие других эффективных каналов релаксации, кроме испускания частичных или расщепленных дислокаций границами зерен, и тем самым позволяет внутренним упругим напряжениям достичь необходимого уровня.



**Рис. 13.** Зависимость отношения равновесной ширины  $s_0$  дефекта упаковки в нанозерне к его ширине  $s^*$  в бесконечной среде от размера зерна  $d$  при разных уровнях внешнего напряжения  $\tau$  (показанных в единицах ГПа у соответствующих кривых) для системы скольжения  $60^\circ$ -I в настоящей модели (сплошные линии) и модели [29] (штриховые линии).

Асаро и Суреш [33] предложили серию дислокационных моделей в попытке объяснить экспериментально наблюдаемую высокую чувствительность механических свойств нанокристаллических ГЦК металлов к скорости деформации (приблизительно

на порядок величины большую по сравнению с поликристаллическими металлами). В рамках этих моделей [33] авторы рассматривали зарождение дислокационных петель как на зернограницных дислокациях, так и на концентраторах напряжений, расположенных на границах зерен. В качестве последних в модели использовались тройные стыки проскальзывающих границ зерен, которые в рамках модели трактовались как микроскопические трещины. Фактически рассматривалось зарождение дислокационных петель в вершине трещины. Авторы определили условия (прежде всего критический размер зерна) для зарождения совершенных и частичных дислокаций, а также деформационных двойников, которые образуются при испускании частичных дислокаций по соседним плоскостям скольжения. В частности, на примере Al было определено, что двойникование становится возможным при размере зерна  $d \leq 20$  нм, что вполне согласуется с экспериментальными данными [19]. Непосредственно коэффициент чувствительности к скорости деформации  $m$  определялся через активационный объем  $v$  как  $m = \sqrt{3}kT/(v\sigma)$  ( $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $\sigma$  – одноосное растягивающее напряжение), который, в свою очередь, связывался с критическим размером (радиусом) дислокационной петли. Под критическим понимался размер, по достижении которого дальнейший процесс протекает атермически. Например, для зарождения совершенной дислокации было получено следующее выражение для критического радиуса  $r_c$  петли

$$r_c \approx \frac{5}{16\pi} d (\ln(r_c / r_0) + 1), \quad (10)$$

из которого следует, что  $r_c$ , а следовательно и активационный объем, монотонно убывают с уменьшением размера зерна  $d$ . Модель Асаро и Суреша предсказывает очень низкие значения активационного объема в диапазоне  $3 - 10b^3$  (а следовательно высокие значения коэффициента  $m$ ), что вполне соответствует экспериментальным данным.

Детальный анализ зарождения и распространения дислокаций из границ зерен в нанокристаллическом Al методами молекулярной динамики [34] выявил следующие факты:

(1) Частичные дислокации (головная и замыкающая) зарождаются в разных точках границы зерна, иногда даже на разных границах зерен. Более того, по мнению авторов [34] замыкающая частичная дислокация *никогда* не зарождается в точности в том же месте, что и головная.

(2) Зарождение и распространение дислокаций – различные процессы. Зачастую частичные дислокации зарождаются, но остаются неподвижными.

(3) Ступеньки на границах зерен могут препятствовать распространению дислокаций в зависимости от геометрии ступенек и вектора Бюргерса дислокаций. Дислокации способны закрепляться на этих ступеньках, что приводит к образованию скоплений петель и увеличению их радиуса кривизны.

(4) Дислокация, проходящая мимо ступеньки на границе зерна, способна «оставить» часть своего вектора Бюргерса на ней, создавая новый концентратор напряжений (источник дислокаций). Таким образом, испускание дислокаций из границ зерен не обязательно приводит к «истощению» границы зерна как источника дислокаций.

(5) В случае, когда дислокация закрепляется на некотором препятствии, время, необходимое для отрыва дислокации от этого препятствия, сильно зависит от температуры. Т.е. процесс отрыва является термически активируемым. В областях между препятствиями распространение дислокаций происходит сравнительно легко и

слабо зависит от температуры.

По мнению авторов работы [34] указанные факты важны и должны учитываться в мезоскопических моделях нанопластичности.

### **3. Испускание дислокаций из аморфных границ зерен в нанокерамиках**

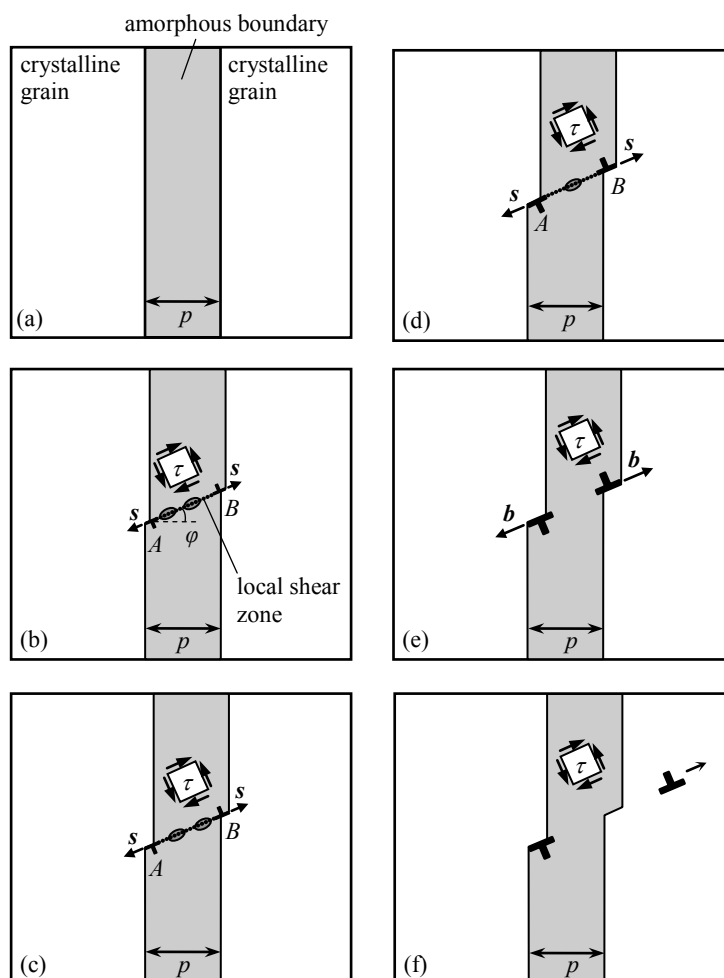
Нанокристаллические керамики, покрытия и пленки проявляют превосходные механические свойства такие как сверхпрочность, сверхтвердость и износостойкость [35–37]. Деформация нанокерамик в значительной степени определяется межзеренными границами, которые зачастую имеют аморфную структуру и занимают значительную долю суммарного объема материала (см., например, экспериментальные данные [37–39] и компьютерные модели [40, 41]). Так, согласно компьютерному моделированию [40], при индентировании происходит переход от межзеренной пластической деформации к внутризеренному решеточному скольжению в кубической фазе нанокристаллического карбида кремния (3C-SiC). На первой стадии индентирования материала пластическая деформация локализована в аморфных межзеренных границах, тогда как на более поздних стадиях реализуется переход к скольжению частичных решеточных дислокаций. В моделировании [40] наблюдались частичные дислокации, соединенные дефектами упаковки с аморфными межзеренными границами, т.е. выпускаемые из них. Компьютерное моделирование [42] показало сходные частичные дислокации, выпускаемые из аморфных слоев, в аморфно-металлических наноламнатах. Помимо этого, дефекты упаковки, соединяющие аморфные прослойки, наблюдались в экспериментах [42] после пластической деформации аморфно-металлических наноламинатов. Соответственно, поскольку действие обычных дислокационных источников в наномасштабных зернах подавлено, логично предположить, что аморфные межзеренные границы становятся альтернативными источниками решеточных дислокаций.

В работе [43] была предложена теоретическая модель зарождения решеточных дислокаций в деформируемых нанокристаллических керамиках с аморфными межзеренными границами посредством локальной пластической деформации в аморфных межзеренных границах в нанокерамиках при механическом нагружении. Остановимся на этой модели подробнее.

Следуя [43], рассмотрим нанокристаллический керамический материал, состоящий из наномасштабных зерен – нанокристаллитов, разделенных аморфными межзеренными границами. Подобный материал представляет собой нанокомпозит, кристаллические зерна и границы которого являются отдельными фазами композита. В общем случае, химический состав этих фаз может быть одинаковым или разным в зависимости от конкретного керамического материала и способа его изготовления.

Согласно данным компьютерной модели [40], в нанокристаллической фазе кубического карбида кремния (3C-SiC) с аморфными межзеренными границами пластическая деформация на первой стадии нагружения реализуется путем межзеренного скольжения, а затем (на второй стадии) происходит переход к решеточному дислокационному скольжению в кристаллических нанозернах. При этом на второй стадии в нанозернах наблюдались частичные дислокации, соединенные дефектами упаковки с аморфными межзеренными границами [40]. На основе указанного наблюдения, а также учитывая факт подавления действия традиционных источников дислокаций в нанозернах, авторы [43] предположили, что дислокации в деформируемых нанокерамиках с аморфной межзеренной фазой могут эффективно зарождаться на аморфных межзеренных границах. Данное утверждение было исследовано в рамках двумерной модели зарождения дислокационного диполя на аморфной границе, представляемой в виде прослойки толщиной  $p$ , в нанокерамическом

материале (рис. 14). Согласно предложенной модели, две дислокации с противоположными по знаку и одинаковыми по модулю векторами Бюргерса зарождаются на противоположных границах раздела между аморфной прослойкой и соседними кристаллическими нанозернами (рис. 14а–е) за счет локальной пластической деформации в некотором сечении  $AB$  аморфной прослойки. В общем случае после зарождения на аморфной межзеренной границе дислокации при определенных условиях скользят внутри соседних нанозерен (рис. 14ф) и таким образом обеспечивают их деформирование.



**Рис. 14.** Схема зарождения дислокаций на аморфной межзеренной границе (серая полоса) в деформируемой нанокерамике. (а) Исходное состояние. (б) В точках  $A$  и  $B$  аморфной межзеренной границы зарождаются дислокации с малыми векторами Бюргерса  $\pm s$  за счет локальной пластической деформации в сечении  $AB$  аморфной межзеренной границы. Элементарными актами пластической деформации в аморфной межзеренной границе являются локальные пластические сдвиги (которые схематически изображены как серые эллипсы в сечении  $AB$ ); см. текст. (с)–(д) Модуль вектора Бюргерса  $s$  постепенно растет за счет локальной пластической деформации в сечении  $AB$  аморфной межзеренной границы. (е) Дислокационный диполь превращается в «обычный» диполь решеточных краевых дислокаций с векторами Бюргерса  $\pm b$ . (ф) Испускание одной из зародившихся дислокаций в соседнее зерно.

Рассмотрим особенности локальной пластической деформации в сечении  $AB$  аморфной межзеренной границы в нанокерамике. Пластическая деформация в металлических стеклах [44] при высоких температурах и аморфном кремнии [45–47] осуществляется за счет отдельных локальных пластических сдвигов. Такие сдвиги представляют собой локальные структурные трансформации и реализуются в атомных кластерах, имеющих избыточный объем и низкое сопротивление сдвигу по сравнению с таковыми окружающей аморфной структуры [44–47]. Аморфный кремний является типичной аморфной структурой с ковалентными межатомными связями и поэтому служит модельной системой для аморфных керамических структур с ковалентными межатомными связями [45–47]. В данном контексте, авторы [43], следуя [45–47], полагали, что локальная пластическая деформация в сечении  $AB$  аморфной межзеренной границы в нанокерамике также осуществляется за счет отдельных локальных пластических сдвигов. При этом локальные пластические сдвиги происходят пространственно-неупорядоченным образом во всем сечении  $AB$  и приводят к постепенному увеличению модуля  $s$  векторов Бюргерса дислокаций в точках  $A$  и  $B$  в процессе их зарождения (рис. 14). Данный процесс схож с процессом зарождения дислокационных диполей в Гам-металле (Gum Metal) [48] и других дислокационных конфигураций в нанокристаллических материалах [49] и тонких пленках [50] посредством идеального наноскопического сдвига. При этом отличительной особенностью зарождения дислокаций является постепенное увеличение модуля их вектора Бюргерса в процессе зарождения [48–50].

Основные параметры, описывающие процесс зарождения дислокационного диполя на аморфных межзеренных границах, – это его энергия и критическое значение внешнего напряжения, необходимое для атермического (без какого-либо энергетического барьера) осуществления такого процесса зарождения (рис. 14а–е). Вслед за авторами [43] проведем расчет зависимости энергии зарождения дислокаций (рис. 14) в нанокерамиках с аморфными межзеренными границами от модуля  $s$  вектора Бюргерса этих дислокаций.

Изменение энергии  $\Delta W$ , характеризующее зарождение дислокационного диполя по схеме, изображенной на рис. 14, представимо в виде следующей суммы:

$$\Delta W = W_e - A, \quad (11)$$

где  $W_e$  – собственная энергия дислокационного диполя,  $A$  – работа внешнего напряжения  $\tau$  по зарождению диполя дислокаций.

Проведем расчет энергии  $\Delta W$  в рамках изотропной линейной теории упругости, полагая в первом приближении нанокерамику упруго изотропным твердым телом с модулем сдвига  $G$  и коэффициентом Пуассона  $\nu$ . При этом собственная энергия дислокационного диполя с учетом энергии ядер дислокаций задается известной формулой [12]:

$$W_e = \frac{Gs^2}{2\pi(1-\nu)} \left( \ln \frac{p/\cos\varphi - s}{s} + 1 \right). \quad (12)$$

Здесь  $s$  – величина вектора Бюргерса дислокаций диполя, изменяющаяся в диапазоне  $0 \leq s \leq b$  ( $b$  – модуль решеточного вектора Бюргерса),  $p$  – толщина границы,  $\varphi$  – угол между направлением сдвига (осью диполя) и нормалью к границе,  $p/\cos\varphi$  – плечо диполя (см. рис. 14b). Работа внешних сдвиговых напряжений  $\tau$  рассчитывается по формуле:

$$A = (\tau - \tau_a)sp / \cos \varphi. \quad (13)$$

Здесь предел текучести  $\tau_a$  аморфной фазы характеризует ее сопротивление пластическому сдвигу в сечении  $AB$ , имеющем длину  $p / \cos \varphi$ . Таким образом, из (11)–(13) имеем:

$$\Delta W = \frac{Gs^2}{2\pi(1-\nu)} \left( \ln \frac{p/\cos \varphi - s}{s} + 1 \right) - (\tau - \tau_a)sp / \cos \varphi. \quad (14)$$

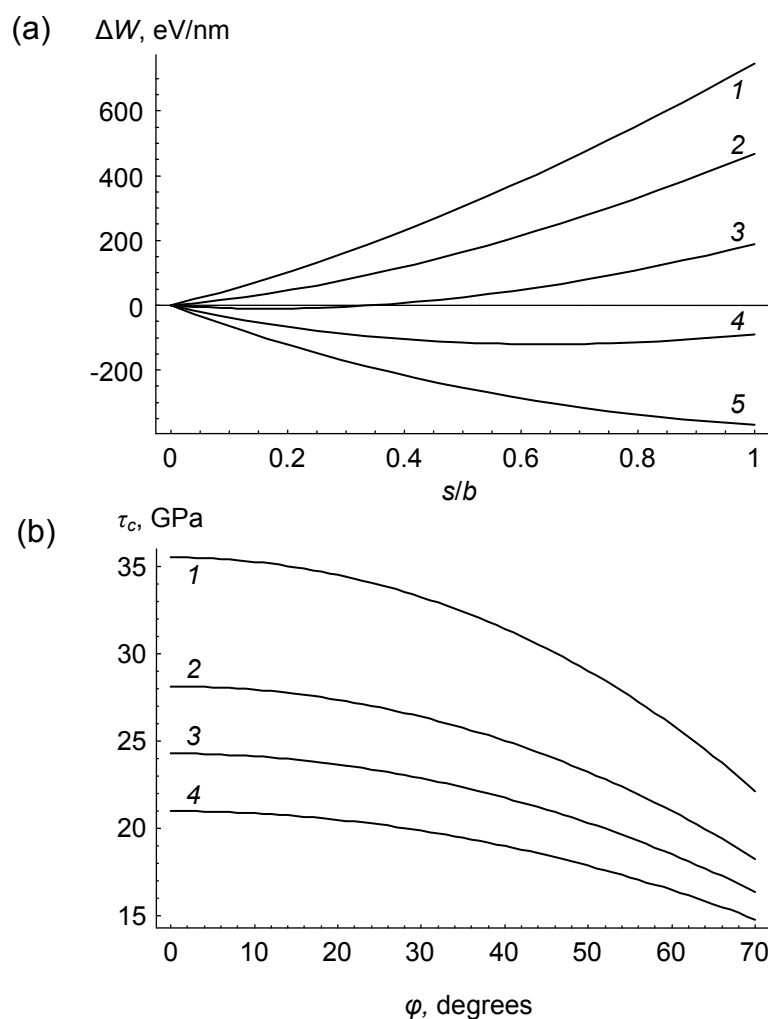
С помощью формулы (14) в работе [43] была сделана оценка значения  $\Delta W$  в случаях нанокристаллического кубического карбида кремния (3C-SiC) и нанокompозита TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. При этом использовались следующие типичные значения параметров 3C-SiC:  $G = 217$  GPa,  $\nu = 0.23$  [51], параметр решетки  $a = 4.36$  Å [52],  $b = a/\sqrt{2} = 3.08$  Å. Для нанокompозита TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> использовалось усредненное значение упругих модулей с учетом объемных долей фаз нанокompозита. Для TiN характерны следующие значения параметров:  $G = 174$  GPa,  $\nu = 0.23$  [53], параметр решетки  $a = 4.24$  Å [54],  $b = a/\sqrt{2} = 3.00$  Å. Упругие константы аморфной фазы a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> имеют значения [55]:  $G \approx 119$  GPa,  $\nu = 0.2$ . Если обозначить объемную долю аморфной фазы a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> как  $f$ , то упругие модули композита TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> представимы следующим образом:  $G_{\text{TiN-Si}_3\text{N}_4} = f G_{\text{Si}_3\text{N}_4} + (1-f)G_{\text{TiN}}$ ,  $\nu_{\text{TiN-Si}_3\text{N}_4} = f \nu_{\text{Si}_3\text{N}_4} + (1-f)\nu_{\text{TiN}}$ . Предполагая для простоты кубическую форму зерен, из элементарных геометрических соображений объемную долю  $f$  можно выразить через толщину границы зерна  $p$  и размер зерна  $d$  как:  $f = \frac{1}{2} \left[ 1 - \left( \frac{d}{d+2p} \right)^3 \right]$ . Для определенности положим  $d = 25$  nm.

Величина предела текучести  $\tau_a$  аморфной фазы (которая обычно имеет зависимость «напряжение - деформация», близкую к таковой для идеального упруго-пластического материала) связана с твердостью материала по Викерсу  $H_V$  феноменологическим соотношением вида:  $\tau_a \approx H_V/3$  [56]. Согласно данным экспериментов [57] и моделирования методами молекулярной динамики [58], твердость аморфного SiC  $H_V \approx 30$  GPa, что дает  $\tau_a \approx 10$  GPa. У аморфного Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> величина предела текучести  $\tau_a \approx 7.7$  GPa, что соответствует экспериментальному значению твердости  $H_V \approx 23$  GPa аморфной фазы a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> [58].

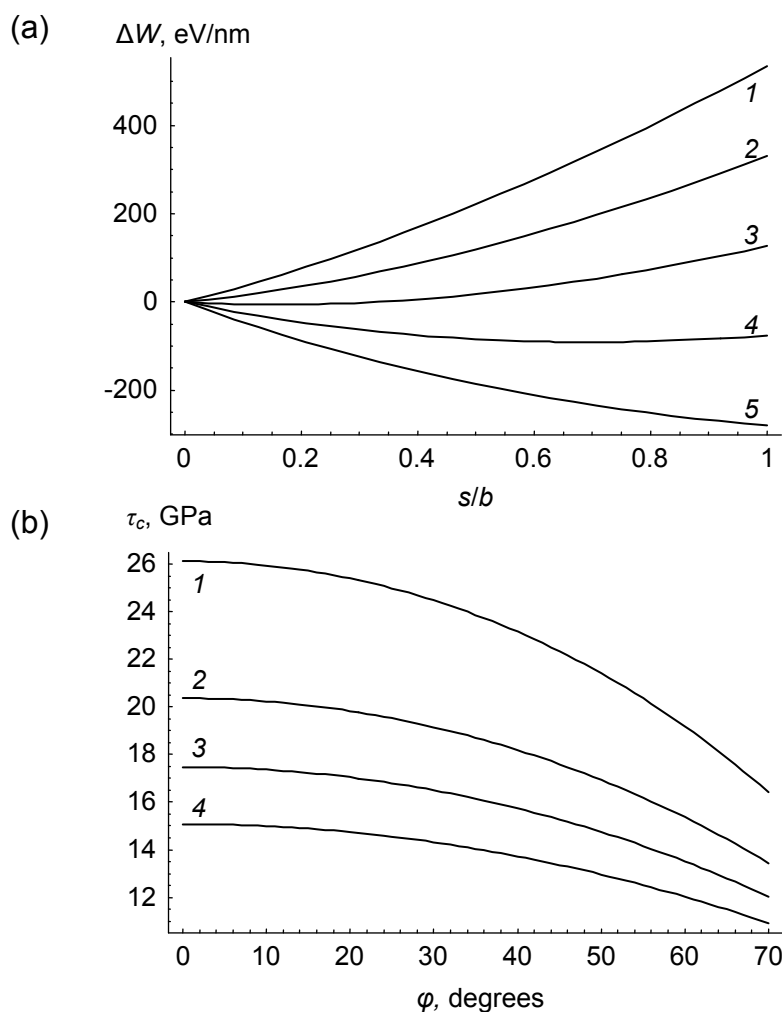
На рис. 15а построены зависимости  $\Delta W(s)$  для случая зарождения дислокационного диполя в аморфной прослойке толщиной  $p = 10$  нм в нанокерамике 3C-SiC для разных значений напряжения  $\tau$  и угла  $\varphi = 45^\circ$ . Видно, что по достижении определенного критического напряжения  $\tau_c$  зависимость  $\Delta W(s)$  становится монотонной в диапазоне  $0 \leq s \leq b$ , т.е. реализуется безбарьерное зарождение диполя дислокаций на аморфной межзеренной границе. Основным геометрическим параметром, определяющим величину критического напряжения  $\tau_c$ , является длина  $p/\cos \varphi$  сечения аморфной межфазной границы, вдоль которой осуществляется пластический сдвиг. На рис. 15b приведены зависимости  $\tau_c(\varphi)$  для разных величин  $p$ . Видно, что с ростом параметров  $p$  и  $\varphi$  в нанокерамике 3C-SiC происходит падение



критического напряжения  $\tau_c$ . Анализ зависимости  $\tau_c(\varphi)$  позволяет сделать вывод, что зарождение дислокаций по рассматриваемому механизму (рис. 14) возможно только на достаточно толстых аморфных межзеренных границах. Так, для  $p = 10$  нм критическое напряжение  $\tau_c$  в зависимости от угла  $\varphi$  варьируется в диапазоне от 15 до 20 ГПа. Хотя эти величины достаточно велики (в частности, превышают предел текучести  $\tau_a$  для аморфной фазы SiC), они достижимы в экспериментах по индентированию. Вместе с тем, для меньших значений  $p$  (кривые 1–3 на рис. 15b) уровень напряжений, необходимых для зарождения дислокационного диполя, существенно выше (особенно при малых углах  $\varphi$ ), т.е. такое зарождение, скорее всего, неосуществимо.



**Рис. 15.** Зависимости, характеризующие процесс зарождения диполя дислокаций на аморфной межзеренной границе в нанокерамике 3C-SiC. (a) Зависимость изменения энергии  $\Delta W$  системы (в результате зарождения дислокационного диполя) от модуля вектора Бюргерса  $s$  дислокаций для следующих значений параметров:  $p = 10$  нм,  $\varphi = 45^\circ$ . Кривые 1, 2, 3, 4 и 5 соответствуют значениям внешнего напряжения  $\tau = 4, 8, 12, 16$  и  $20$  ГПа, соответственно. (b) Зависимость критического напряжения  $\tau_c$  (при котором реализуется безбарьерное зарождение дислокационного диполя) от угла  $\varphi$ , определяющего ориентацию плоскости действия максимальных касательных напряжений. Кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям толщины аморфной прослойки  $p = 3, 5, 7, 10$  нм, соответственно.

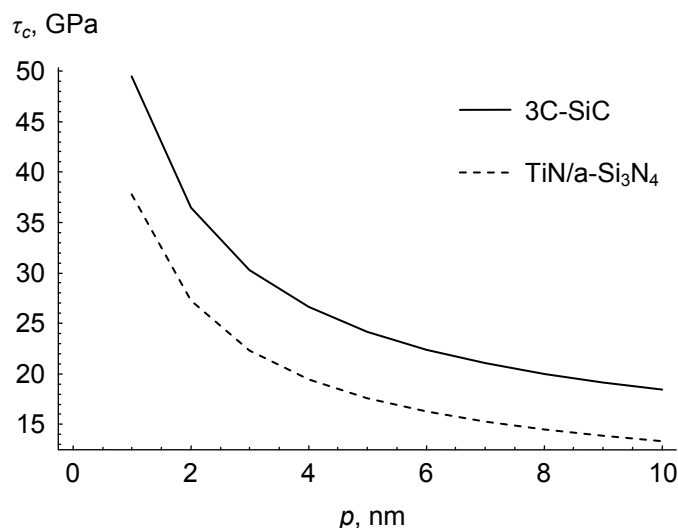


**Рис. 16.** Зависимости, характеризующие процесс зарождения диполя дислокаций на аморфной межзеренной границе в нанокompозите TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. (a) Зависимость изменения энергии  $\Delta W$  системы (в результате зарождения дислокационного диполя) от модуля вектора Бюргерса  $s$  дислокаций для следующих значений параметров:  $p = 10$  нм,  $\phi = 45^\circ$ . Кривые 1, 2, 3, 4 и 5 соответствуют значениям внешнего напряжения  $\tau = 4, 6, 9, 12$  и  $15$  ГПа, соответственно. (b) Зависимость критического напряжения  $\tau_c$  (при котором реализуется безбарьерное зарождение дислокационного диполя) от угла  $\phi$ , определяющего ориентацию плоскости действия максимальных касательных напряжений. Кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям толщины аморфной прослойки  $p = 3, 5, 7, 10$  нм, соответственно.

Рисунок 16a,b представляет зависимости  $\Delta W(s)$  (для  $p = 10$  нм,  $\phi = 45^\circ$  и разных значений внешнего напряжения  $\tau$ ) и  $\tau_c(\phi)$  (для разных значений  $p$ ) в случае нанокompозита TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. Выводы, сделанные выше для 3C-SiC, полностью справедливы и для TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. Т.е. генерация дислокационного диполя на аморфной межфазной границе происходит при реалистичных значениях внешнего напряжения, только если толщина  $p$  границы достаточно велика (10 нм и более). Например, при  $p = 10$  нм критическое напряжение лежит в диапазоне от 11 до 15 ГПа в зависимости от величины угла  $\phi$ . Эти значения превышают величину предела текучести  $\tau_a$  для аморфной фазы Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, но достижимы в экспериментах по индентированию. Более

детально зависимости  $\tau_c(p)$  для нанокерамик 3C-SiC и TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> при  $\varphi = 45^\circ$  приведены на рис. 17. Хорошо видна тенденция к значительному росту  $\tau_c$  с уменьшением толщины границы  $p$  (а, следовательно, и объемной доли  $f$  зернограничной аморфной фазы). Эта тенденция соответствует экспериментальным данным [59] для нанокompозита TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, указывающим на рост твердости с уменьшением объемной доли аморфной фазы.

Следует также отметить, что величины критического напряжения  $\tau_c$ , оценка которых приведена выше, весьма значительны. В частности, напряжение  $\tau_c$  превышает напряжение Пайерлса  $\tau_p$ , которое в керамиках имеет высокие значения. (Из-за высоких значений  $\tau_p$ , движение дислокаций в кристаллических керамиках практически полностью подавлено при низких температурах [60].) В первом приближении напряжение Пайерлса можно считать равным пределу текучести  $\tau_p \approx H_V/3$  [60]. Тогда для 3C-SiC, твердость которого  $H_V \approx 42$  GPa [61], напряжение Пайерлса  $\tau_p \approx 14$  GPa. В случае TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> напряжение Пайерлса  $\tau_p \approx 9$  GPa, поскольку для кристаллической фазы TiN твердость  $H_V \approx 27$  GPa [59]. Таким образом, значения  $\tau_c$  выше  $\tau_p$  во всех диапазонах значений параметров исследуемых нанокерамик. Это означает, что после зарождения дислокаций на аморфных межзеренных границах, эти дислокации достаточно легко скользят в кристаллической фазе. Иными словами, критическое напряжение  $\tau_c$  для зарождения дислокаций на аморфных межзеренных границах определяет переход от пластической деформации в аморфной фазе к решеточному скольжению в нанозернах.

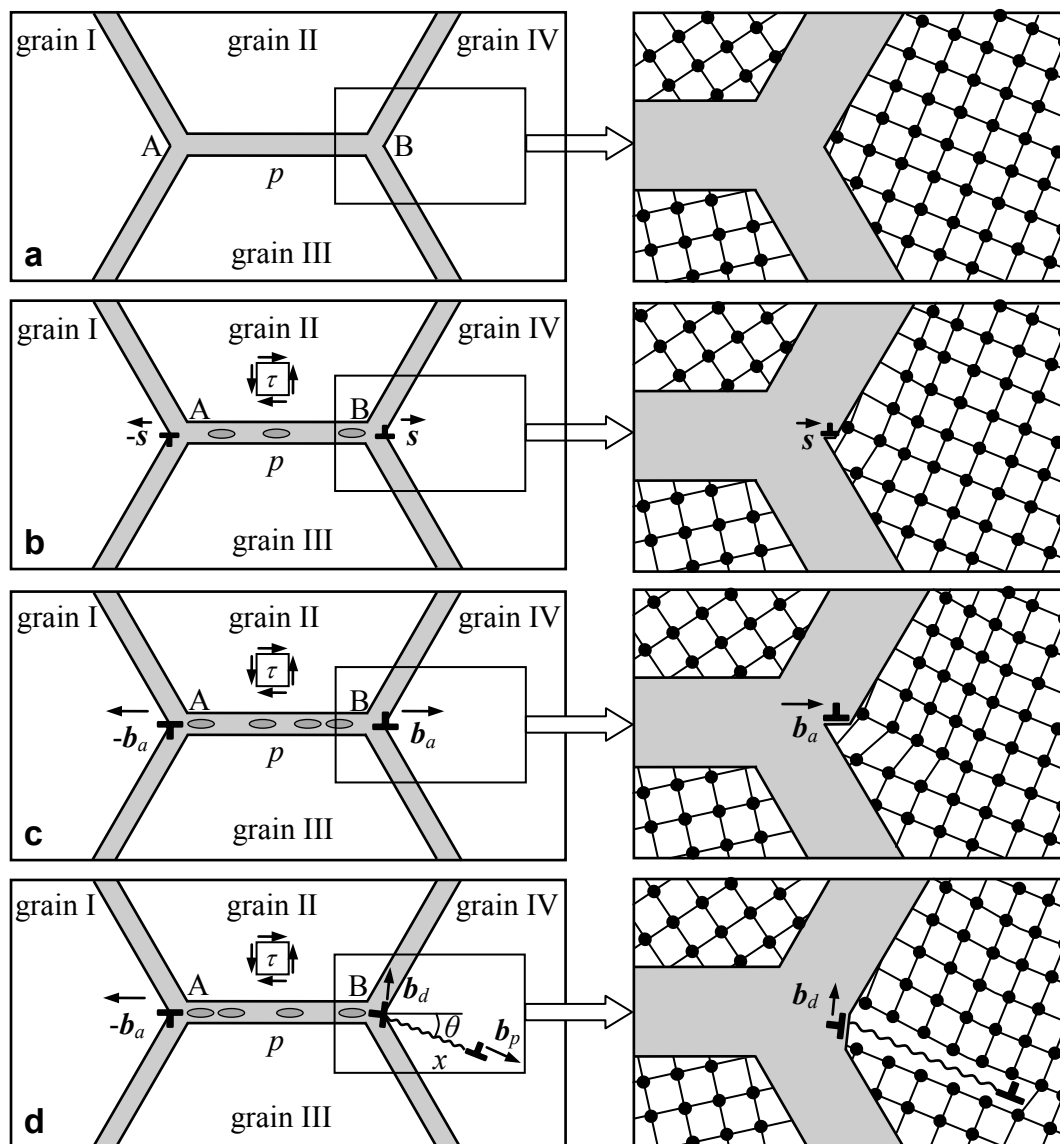


**Рис. 17.** Зависимость критического напряжения  $\tau_c$  (при котором реализуется безбарьерное зарождение дислокационного диполя) для нанокompозита TiN/a-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> от толщины  $p$  аморфной межзеренной границы при  $\varphi = 45^\circ$ .

Отметим, что зарождение дислокаций на аморфных межзеренных границах является специфическим для нанокристаллических керамики, в которых действие традиционных дислокационных источников типа Франка-Рида подавлено из-за наномасштабных эффектов и влияния внутренних поверхностей раздела. Вместе с тем, традиционные дислокационные источники эффективно работают в обычных поликристаллических керамиках. При этом аморфные межзеренные границы не

являются значимыми для генерирования решеточных дислокаций.

Модель [43] получила дальнейшее развитие в работе [62], где была рассмотрена сходная генерация дисклинационного диполя на аморфной межзеренной границе, но в несколько иной геометрии (рис. 18). В отличие от работы [43], помимо генерации диполя было также исследовано и испускание решеточной дислокации в тело зерна.



**Рис. 18.** Генерация дислокационного диполя на аморфной межзеренной границе с последующим испусканием частичной дислокации в соседнее зерно в нанокристаллической керамике. (а) Исходное бездислокационное состояние. Зерна I, II, III, IV разделены аморфными межзеренными границами (серые полосы). (б) Генерация диполя краевых дислокаций с векторами Бюргерса  $\pm s$  в результате локальных сдвигов (обозначены эллипсами) внутри границы. (с) Дальнейший пластический сдвиг в аморфной межзеренной границе ведет к увеличению векторов Бюргерса дислокаций до величины  $\pm b_a$ . (d) Расщепление одной из дислокаций диполя приводит к формированию остаточной неподвижной дислокации и мобильной частичной дислокации, скользящей внутри зерна IV и оставляющей дефект упаковки за собой (волнистая линия). Reprinted from [62]. Copyright 2008, with permission from Elsevier.

В рамках модели [62] в качестве источника дислокаций выступает граница АВ (рис. 18а). Под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$  в продольном сечении (а не в поперечном как в [43]) этой аморфной границы происходит пластический сдвиг. Как и в [43] пластический сдвиг представляется как диполь краевых дислокаций (рис. 18б,с). Краевые дислокации диполя, зарождающегося на аморфной границе, являются концентраторами напряжений, на которых могут зарождаться решеточные дислокации, способные скользить в соседних кристаллитах (рис. 18д).

Авторы [62] рассчитали по отдельности изменения энергии системы в результате зарождения дислокационного диполя и скользящей дислокации на диполе и определили соответствующие критические напряжения  $\tau_{c1}$  и  $\tau_{c2}$ , при которых первый и второй процессы происходят безбарьерным образом. Критическое напряжение  $\tau_{c1}$  для зарождения дислокационного диполя задается выражением:

$$\tau_{c1} = \tau_a + \frac{Db_a}{p} \left( \ln \frac{p-b_a}{b_a} + \frac{1}{2} \frac{p-2b_a}{p-b_a} \right), \quad (15)$$

где  $D = G / [2\pi(1-\nu)]$ ,  $\tau_a$  – предел текучести аморфной фазы,  $p$  – длина границы АВ (рис. 18а) и  $b_a$  – модуль вектора Бюргерса дислокационного диполя (рис. 18с). Для второго критического напряжения  $\tau_{c2}$  испускания частичной дислокации в тело зерна было найдено следующее выражение:

$$\tau_{c2} = \max\{\tau_{c2}', \tau_{c2}''\}, \quad (16)$$

где

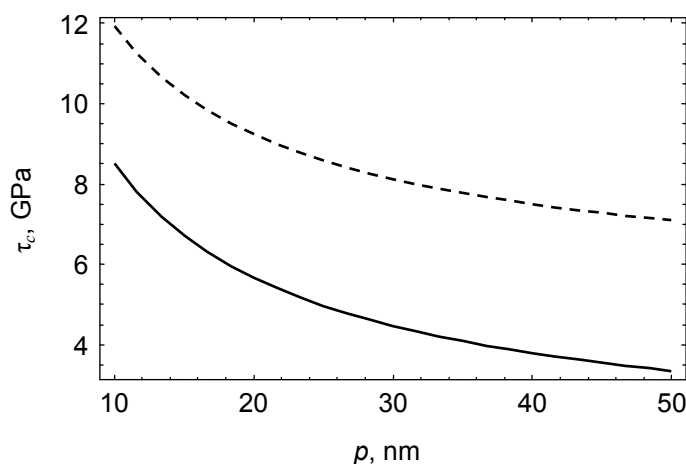
$$\tau_{c2}' = \tau_p + \frac{D}{x_0 \cos 2\theta} \left\{ b_p \left( \ln \frac{b_a}{b_p} + 1 \right) + b_a \left[ \cos \theta \left( \ln \frac{L_0 b_p}{px_0} - 1 \right) - \frac{px_0 \sin^2 \theta}{L_0^2} \right] \right\} + \frac{\gamma}{b_p \cos 2\theta}, \quad (17)$$

$$\tau_{c2}'' = \tau_p + \frac{D}{\cos 2\theta} \left\{ \frac{b_p}{x_0} - \frac{b_a p}{L_0^2} \left[ \frac{\cos \theta (p + x_0 \cos \theta)}{x_0} + \frac{(p^2 - x_0^2) \sin^2 \theta}{L_0^2} \right] \right\} + \frac{\gamma}{b_p \cos 2\theta}. \quad (18)$$

Здесь  $x_0 = b_a + b_p$ ,  $L_0 = \sqrt{p^2 + x_0^2 + 2px_0 \cos \theta}$ ,  $b_p$  – модуль вектора Бюргерса частичной дислокации,  $\gamma$  – энергия дефекта упаковки.

Расчеты [62] показали, что, как правило,  $\tau_{c1} < \tau_{c2}$ . Только в области значений  $p$  порядка или меньше 10 nm первое критическое напряжение  $\tau_{c1}$  может становиться больше  $\tau_{c2}$ . Отсюда можно сделать вывод, что пластическая деформация в нанокристаллическом SiC в первую очередь будет инициироваться в аморфных прослойках и лишь при повышении напряжения передаваться в кристаллиты. Используя  $\tau_{c1}$  и  $\tau_{c2}$ , можно определить критическое напряжение  $\tau_c$  как функцию

параметров  $p$  и  $\theta$ , при котором одновременно безбарьерным путем осуществляется деформация в аморфной фазе (зарождение диполя на аморфной межзеренной границе) и испускание частичных дислокаций в кристаллиты. Величина  $\tau_c$  является напряжением перехода от деформации межзеренным проскальзыванием к деформации путем внутризеренного дислокационного скольжения. Для этого при фиксированных значениях  $p$  и  $\theta$  необходимо решить (численно) уравнение  $\tau_{c1}(b_a) = \tau_{c2}(b_a)$ . Из этого уравнения определяется величина вектора Бюргерса  $b_a^*$ , при которой достигается равенство критических напряжений  $\tau_{c1}$  и  $\tau_{c2}$ . Соответственно, критическое напряжение  $\tau_c = \tau_{c1}(b_a^*) = \tau_{c2}(b_a^*)$ . На рис. 19 построена зависимость  $\tau_c(p)$  для значения  $\theta = 20^\circ$  (сплошная линия) и  $\tau_a = 1$  ГПа. Видно, что в зависимости от значения  $p$  критическое напряжение  $\tau_c$  изменяется в диапазоне 5–9 ГПа, что реально достижимо в 3C-SiC. Пунктирной линией на рис. 19 для сравнения приведена зависимость  $\tau_c(p)$ , построенная в предположении атермической деформации в аморфной фазе, когда  $\tau_a = 5$  ГПа (оценка из работы [43]). В последнем случае диапазон изменения  $\tau_c$  составляет 8–12 ГПа. Этот уровень напряжений также достижим в 3C-SiC.



**Рис. 19.** Зависимость критического напряжения  $\tau_c$  (при котором происходит переход от деформации межзеренным проскальзыванием к деформации путем внутризеренного дислокационного скольжения) от длины аморфной границы  $p$  для  $\theta = 20^\circ$ ,  $\tau_a = 1$  ГПа и 5 ГПа (сплошная и пунктирные кривые соответственно). Reprinted from [62]. Copyright 2008, with permission from Elsevier.

В итоге, в работе [62] делается вывод, что процесс эмиссии дислокаций из аморфных межзеренных границ в деформируемых нанокерамиках энергетически выгоден и может протекать атермически. Критическое напряжение необходимое для осуществления этого процесса уменьшается с увеличением длины границы (т.е. размера зерна). Или, другими словами, переход от межзеренного проскальзывания к внутризеренному дислокационному скольжению затрудняется по мере уменьшения размера зерна.

#### 4. Заключение

Таким образом, границы зерен в нанокристаллических материалах играют важную роль в процессах пластической деформации. В типичной для нанокристаллических

материалов ситуации, когда действие стандартных дислокационных источников (типа Франка-Рида) подавлено в силу малого размера зерна, границы зерен способны выступать в качестве альтернативных источников мобильных дислокаций.

В работах, рассмотренных в настоящей работе, было показано, что скользящие решеточные дислокации могут образовываться в результате разнообразных процессов. Эти процессы включают в себя распад малоугловых границ, гетерогенное зарождение скользящих дислокаций на зернограницных дислокациях и дислокациях, формирующихся в ходе межзеренного проскальзывания и прочих сдвиговых явлениях, протекающих в зернограницной фазе. Рассмотренные механизмы эмиссии дислокаций из границ зерен объясняют некоторые особенности пластической деформации пластической деформации наноматериалов и находят подтверждение в экспериментальных наблюдениях.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0353).*

## Литература

- [1] C. Suryanarayana // *Inter. Mater. Rev.* **40** (1995) 41.
- [2] K.S. Kumar, H. Swygenhoven, S. Suresh // *Acta Mater.* **51** (2003) 5743.
- [3] E.O. Hall // *Proc. Phys. Soc. London B* **64** (1951) 747.
- [4] N.J. Petch // *J. Iron Steel Inst.* **174** (1953) 25.
- [5] C.S. Pande, R.A. Masumura, R.W. Armstrong // *Nanostruct. Mater.* **2** (1993) 323.
- [6] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *Физическая механика деформируемых наноструктур. Том 1*, (Янус, Санкт-Петербург 2003).
- [7] Q. Wei, D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma // *Appl. Phys. Lett.* **81** (2002) 1240.
- [8] V. Bata, E.V. Pereloma // *Acta Mater.* **52** (2004) 657.
- [9] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **52** (2004) 3793.
- [10] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. *Interfaces in crystalline materials* (Claredon Press, Oxford, 1995).
- [11] D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma // *Acta Mater.* **51** (2003) 3495.
- [12] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*, (Атомиздат, Москва, 1974).
- [13] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. *Дисклинации в кристаллах*, (Наука, Ленинград, 1986).
- [14] U.F. Kocks, A.S. Argon, M.F. Ashby // *Progr. Mater. Sci.* **19** (1975) 1.
- [15] J.R. Weertman, P.G. Sanders // *Sol. State Phenom.* **35-36** (1994) 249.
- [16] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang // *Acta Mater.* **51** (2003) 387.
- [17] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, S.G. Srinivasan, M.I. Baskes, D.W. He, Y.T. Zhu // *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 632.
- [18] M.W. Chen, E. Ma, K.J. Hemker, H.W. Sheng, Y.M. Wang, X.M. Cheng // *Science* **300** (2003) 1275.
- [19] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu // *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 5062.
- [20] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 592.
- [21] D. Udler, D.N. Seidman // *Phys. Rev. B* **54** (1996) R11133.
- [22] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **52** (2004) 1201.
- [23] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials* // (Springer, Berlin 2004).
- [24] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Acta Mater.* **52** (2004) 1711.

- [25] X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, Y.H. Zhao, M.I. Baskes, Y.T. Zhu, F. Zhou, E.J. Lavernia, H.F. Xu // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 3564.
- [26] М.А. Штремель. *Прочность сплавов. Часть I. Дефекты решетки*, (МИСИС, Москва, 1999).
- [27] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, E.J. Lavernia // *J. Appl. Phys.* **98** (2005) 034319.
- [28] R.C. Pond, L.M.F. Garcia-Garcia // *Inst. Phys. Conf. Ser. No.* **61** (1981) 495.
- [29] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, Y.H. Zhao, M.I. Baskes, F. Zhou, E.J. Lavernia // *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 5049.
- [30] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **7** (2004) 75.
- [31] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько // *ФТТ* **48** (2006) 1410.
- [32] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Phys. Rev. B* **73** (2006) 064102.
- [33] R.J. Asaro, S. Suresh // *Acta Mater.* **53** (2005) 3369.
- [34] H. Van Swygenhoven, P.M. Derlet, A.G. Frøseth // *Acta Mater.* **54** (2006) 1975.
- [35] S. Veprek // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **5** (2003) 6.
- [36] G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **10** (2005) 185.
- [37] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [38] X. Zhou, D.M. Hulbert, J.D. Kunz, R.K. Sadangi, V. Shukla, B. Kear, A.K. Mukherjee // *Mater. Sci. Eng. A* **394** (2005) 353.
- [39] X. Xu, T. Nishimura, N. Hirotsaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka // *Acta Mater.* **54** (2006) 255.
- [40] I. Szlufarska, A. Nakano, P. Vashista // *Science* **309** (2005) 911.
- [41] Y. Mo, I. Szlufarska // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 181926.
- [42] Y. Wang, J. Li, A.V. Hamza, T.W. Barbee Jr. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** (2007) 11155.
- [43] С.В. Бобылев, И.А. Овидько // *ФТТ* **50** (2008) 617.
- [44] A.S. Argon // *Acta Mater.* **27** (1979) 47.
- [45] M.J. Demkowicz, A.S. Argon // *Phys. Rev. Lett.* **93**, 025505 (2004).
- [46] M.J. Demkowicz, A.S. Argon // *Phys. Rev. B* **72** (2005) 245205.
- [47] M.J. Demkowicz, A.S. Argon // *Phys. Rev. B* **72** (2005) 245206.
- [48] M.Yu Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **54** (2006) 2489.
- [49] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 211901.
- [50] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *J. Phys.: Condens. Matter* **19** (2007) 056008.
- [51] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2004) 184117.
- [52] J. Kräußlich, A.J. Bauer, B. Wunderlich, K. Goetz // *Mater. Sci. Forum* **353–356** (2001) 319.
- [53] A.S. Maxwell, S. Owen-Jones, N.M. Jennett // *Rev. Sci. Instrum.* **75** (2004) 970.
- [54] M. Marlo, V. Milman // *Phys. Rev. B* **62** (2000) 2899.
- [55] A. Khan, J. Philip, P. Hess // *J. Appl. Phys.* **95** (2004) 1667.
- [56] S. Veprek, S. Mukherjee, P. Karvankova, H.-D. Mannling, J.L. He, K. Moto, J. Prochazka, A.S. Argon // *J. Vac. Sci. Technol. A* **21** (2003) 532.
- [57] M.A.E. Khakani, M. Chaker, A. Jean, S. Boily, J.C. Kieffer, M.E. O'Hern, M.F. Ravet, F. Rousseaux // *J. Mater. Res.* **9** (1994) 96.
- [58] I. Szlufarska, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta // *Appl. Phys. Lett.* **86** (2005) 021915.
- [59] J. Patscheider // *Mater. Res. Soc. Bull.* **28** (2003) 180.
- [60] Yu.V. Milman, In: *Materials Science of Carbides, Nitrides and Borides*, ed. by Yu.G. Gogotsi, R.A. Andrievskii, (Kluwer, Dordrecht, 1998), p. 323.
- [61] V.I. Ivashchenko, P.E. Turchi, V.I. Shevchenko // *Phys. Rev. B* **75** (2007) 085209.
- [62] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Scr. Mater.* **60** (2009) 36.



# THEORETICAL MODELS OF DISLOCATION EMISSION FROM GRAIN BOUNDARIES IN DEFORMED NANOCRYSTALLINE MATERIALS

S.V. Bobylev<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup>Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,  
Bolshoj 61, Vasil. 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: bobylev.s@gmail.com

**Abstract.** An overview of theoretical models of dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials under plastic deformation is presented. It is shown that grain boundaries can serve as effective alternative sources of mobile dislocations when the standard dislocation sources are suppressed. The discussed dislocation emission mechanisms are responsible for some specific, experimentally observed features of plastic deformation in nanocrystalline materials.

## References

- [1] C. Suryanarayana // *Inter. Mater. Rev.* **40** (1995) 41.
- [2] K.S. Kumar, H. Swygenhoven, S. Suresh // *Acta Mater.* **51** (2003) 5743.
- [3] E.O. Hall // *Proc. Phys. Soc. London B* **64** (1951) 747.
- [4] N.J. Petch // *J. Iron Steel Inst.* **174** (1953) 25.
- [5] C.S. Pande, R.A. Masumura, R.W. Armstrong // *Nanostruct. Mater.* **2** (1993) 323.
- [6] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials*. (Springer, Berlin - Heidelberg - N.Y., 2004).
- [7] Q. Wei, D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma // *Appl. Phys. Lett.* **81** (2002) 1240.
- [8] V. Bata, E.V. Pereloma // *Acta Mater.* **52** (2004) 657.
- [9] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **52** (2004) 3793.
- [10] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. *Interfaces in crystalline materials* (Claredon Press, Oxford, 1995).
- [11] D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma // *Acta Mater.* **51** (2003) 3495.
- [12] J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [13] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro (North Holland, Amsterdam, 1992), Vol. 9, p. 191.
- [14] U.F. Kocks, A.S. Argon, M.F. Ashby // *Progr. Mater. Sci.* **19** (1975) 1.
- [15] J.R. Weertman, P.G. Sanders // *Sol. State Phenom.* **35-36** (1994) 249.
- [16] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang // *Acta Mater.* **51** (2003) 387.
- [17] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, S.G. Srinivasan, M.I. Baskes, D.W. He, Y.T. Zhu // *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 632.
- [18] M.W. Chen, E. Ma, K.J. Hemker, H.W. Sheng, Y.M. Wang, X.M. Cheng // *Science* **300** (2003) 1275.
- [19] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu // *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 5062.

- [20] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 592.
- [21] D. Udler, D.N. Seidman // *Phys. Rev. B* **54** (1996) R11133.
- [22] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **52** (2004) 1201.
- [23] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials* // (Springer, Berlin, 2004).
- [24] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Acta Mater.* **52** (2004) 1711.
- [25] X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, Y.H. Zhao, M.I. Baskes, Y.T. Zhu, F. Zhou, E.J. Lavernia, H.F. Xu // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 3564.
- [26] M.A. Shtremel. *Strength of alloys. Part I. Lattice defects*. (MISIS, Moscow, 1999).
- [27] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, E.J. Lavernia // *J. Appl. Phys.* **98** (2005) 034319.
- [28] R.C. Pond, L.M.F. Garcia-Garcia // *Inst. Phys. Conf. Ser. No.* **61** (1981) 495.
- [29] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, Y.H. Zhao, M.I. Baskes, F. Zhou, E.J. Lavernia // *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 5049.
- [30] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **7** (2004) 75.
- [31] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Phys. Solid State* **48** (2006) 1495.
- [32] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Phys. Rev. B* **73** (2006) 064102.
- [33] R.J. Asaro, S. Suresh // *Acta Mater.* **53** (2005) 3369.
- [34] H. Van Swygenhoven, P.M. Derlet, A.G. Frøseth // *Acta Mater.* **54** (2006) 1975.
- [35] S. Veprek // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **5** (2003) 6.
- [36] G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **10** (2005) 185.
- [37] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [38] X. Zhou, D.M. Hulbert, J.D. Kunz, R.K. Sadangi, V. Shukla, B. Kear, A.K. Mukherjee // *Mater. Sci. Eng. A* **394** (2005) 353.
- [39] X. Xu, T. Nishimura, N. Hirosaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka // *Acta Mater.* **54** (2006) 255.
- [40] I. Szlufarska, A. Nakano, P. Vashista // *Science* **309** (2005) 911.
- [41] Y. Mo, I. Szlufarska // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 181926.
- [42] Y. Wang, J. Li, A.V. Hamza, T.W. Barbee Jr. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** (2007) 11155.
- [43] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Phys. Solid State* **50** (2008) 642.
- [44] A.S. Argon // *Acta Mater.* **27** (1979) 47.
- [45] M.J. Demkowicz, A.S. Argon // *Phys. Rev. Lett.* **93**, 025505 (2004).
- [46] M.J. Demkowicz, A.S. Argon // *Phys. Rev. B* **72** (2005) 245205.
- [47] M.J. Demkowicz, A.S. Argon // *Phys. Rev. B* **72** (2005) 245206.
- [48] M.Yu Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **54** (2006) 2489.
- [49] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 211901.
- [50] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *J. Phys.: Condens. Matter* **19** (2007) 056008.
- [51] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2004) 184117.
- [52] J. Kräußlich, A.J. Bauer, B. Wunderlich, K. Goetz // *Mater. Sci. Forum* **353–356** (2001) 319.
- [53] A.S. Maxwell, S. Owen-Jones, N.M. Jennett // *Rev. Sci. Instrum.* **75** (2004) 970.
- [54] M. Marlo, V. Milman // *Phys. Rev. B* **62** (2000) 2899.
- [55] A. Khan, J. Philip, P. Hess // *J. Appl. Phys.* **95** (2004) 1667.
- [56] S. Veprek, S. Mukherjee, P. Karvankova, H.-D. Mannling, J.L. He, K. Moto, J. Prochazka, A.S. Argon // *J. Vac. Sci. Technol. A* **21** (2003) 532.
- [57] M.A.E. Khakani, M. Chaker, A. Jean, S. Boily, J.C. Kieffer, M.E. O'Hern, M.F. Ravet, F. Rousseaux // *J. Mater. Res.* **9** (1994) 96.
- [58] I. Szlufarska, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta // *Appl. Phys. Lett.* **86** (2005) 021915.

- [59] J. Patscheider // *Mater. Res. Soc. Bull.* **28** (2003) 180.
- [60] Yu.V. Milman, In: *Materials Science of Carbides, Nitrides and Borides*, ed. by Yu.G. Gogotsi, R.A. Andrievskii, (Kluwer, Dordrecht, 1998), p. 323.
- [61] V.I. Ivashchenko, P.E. Turchi, V.I. Shevchenko // *Phys. Rev. B* **75** (2007) 085209.
- [62] S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko // *Scr. Mater.* **60** (2009) 36.