

ЗАРОЖДЕНИЕ И СЛИЯНИЕ НАНОТРЕЩИН ПРИ ЗЕРНОГРАНИЧНОМ СКОЛЬЖЕНИИ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Н.Ф. Морозов^{1,2}, И.А. Овидько^{1,2*}, Ю.В. Петров^{1,2}, А.Г. Шейнерман²

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Библиотечная пл., 2,
Старый Петергоф, Санкт-Петербург 198504, Россия

²Институт проблем машиноведения Российской Академии наук,
Большой пр. В.О., 61, Санкт-Петербург 199178, Россия

* Email: ovidko@def.ipme.ru

Аннотация. Разработан критерий слияния зернограничных нанотрещин, образующихся в нанокристаллических материалах (НКМ) в процессе зернограничного скольжения, в катастрофическую макротрещину. Сделаны оценки предела прочности НКМ, характеризующего образование такой макротрещины, и предельной деформации до разрушения такого материала. Показано, что предел прочности НКМ, деформируемого посредством межзеренного скольжения, значительно увеличивается с ростом углов ориентации границ его зерен.

Ключевые слова: нанокристаллические материалы, зернограничное скольжение, трещины, разрушение

1. Введение

Хорошо известно, что процессы нано- и макроразрушения в нанокристаллических материалах (НКМ) отличаются от соответствующих процессов разрушения их традиционных поликристаллических аналогов (см., например, монографию [1]). Особенности процессов разрушения НКМ прежде всего обусловлены наноскопическими размерами их зерен и присутствием ансамблей границ зерен (ГЗ), занимающих предельно большую объемную долю в таких твердых телах [2]. Как следствие, наряду с результатами классических механических теорий прочности (например, [3,4]), при анализе разрушения НКМ необходимо учитывать особенности их структуры. В теоретических работах [5,6] экспериментально наблюдаемое хрупкое разрушение НКМ связывалось с катастрофическим слиянием большого числа наноскопических трещин (нанотрещин). При этом основное внимание уделялось определению условий слияния уже существующих нанотрещин, в то время как процессы зарождения нанотрещин не исследовались, и оценка величин предела прочности σ_B и пластической деформации до разрушения \mathcal{E}_f не проводилась. Основная цель настоящей статьи – разработка детальной теоретической модели множественного зарождения нанотрещин и их катастрофического слияния в деформируемых НКМ. В рамках модели мы рассматриваем зарождение нанотрещин, инициируемое зернограничным (межзеренным) скольжением (одним из доминирующих механизмов пластической деформации НКМ), и на основе заданных характеристик материала (упругих модулей, размера зерна, предела текучести и распределения ГЗ по углам ориентации) проводим оценку предела прочности НКМ σ_B и величины его пластической деформации до разрушения \mathcal{E}_f .

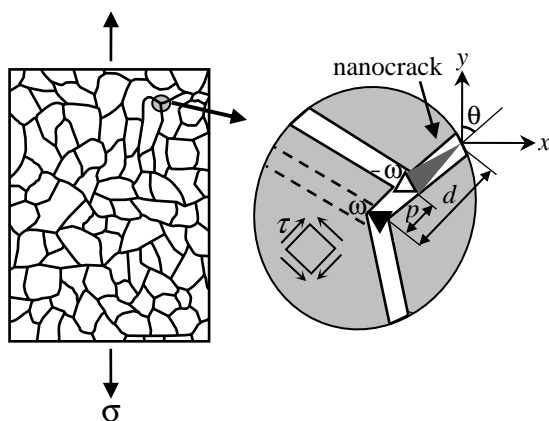


Рис. 1. Нанокристаллический образец под действием одноосной растягивающей нагрузки. Эллипс показывает дисклинационный диполь и нанотрещину, которая образовалась в одной из границ зерен в результате зернограничного скольжения.

2. Модель

Рассмотрим нанокристаллический образец, находящийся под действием растягивающего внешнего напряжения $\sigma_{yy} = \sigma$ (рис. 1). Пусть этот образец пластически деформируется посредством зернограничного скольжения. Зернограничное скольжение приводит к зарождению вблизи тройных стыков ГЗ дисклинационных диполей [7,8]. Образование дисклинационных диполей связано с перемещением ГЗ при зернограничном скольжении из тройных стыков ГЗ в новые положения [7,9]. При этом одна из дисклинаций диполя располагается в тройном стыке ГЗ, а вторая дисклинация смещена относительно нее на расстояние, равное скачку перемещений вдоль ГЗ при зернограничном скольжении (рис. 1,b). Для случая границ наклона дисклинации являются клиновыми, а их мощности равны по модулю углам разориентации перемещающихся ГЗ или отклонению углов разориентации ГЗ от $2\pi/m$, где m – порядок оси симметрии кристалла. Дисклинационные диполи, образующиеся в ГЗ, препятствуют зернограничному скольжению, обеспечивая деформационное упрочнение НКМ [7].

При достаточно высоких значениях мощности дисклинаций, составляющих диполи, и больших расстояниях между дисклинациями, напряжения, создаваемые дисклинациями приводят к зарождению раскалывающих нанотрещин [9]. Мы полагаем, что эти нанотрещины могут служить зародышами для образования нанотрещин большего размера, растущих в результате сдвига поверхностей нанотрещины в процессе зернограничного скольжения. В дальнейшем будем считать, что длина образующихся зернограничных нанотрещин примерно равна скачку перемещений на ГЗ при зернограничном скольжении. Кроме того, учитывая наноскопические размеры трещин и большие углы между плоскостями соседних ГЗ, будем считать, что формирование нанотрещины в ГЗ не зависит от событий формирования нанотрещин в остальных ГЗ. Как следствие, образование макроскопической трещины – носителя катастрофического разрушения – является результатом элементарных независимых событий формирования нанотрещин в ГЗ.

При указанных предположениях процесс распространения трещин вдоль ГЗ может быть описан с помощью математических методов теории протекания [10,11]. В соответствии с общими представлениями теории протекания [10,11] в рассматриваемом нами случае получаем, что рост макротрещины, проходящей через весь кристалл, то есть формирование бесконечного кластера, состоящего из ГЗ, содержащих нанотрещины, возможно при превышении долей ГЗ, содержащих нанотрещины, некоторого критического значения n_c .

Пусть все ГЗ имеют одинаковую длину d . Будем предполагать, что нанотрещины, независимо образующиеся в соседних ГЗ в результате зернограничного скольжения, сливаются, если длина всех таких нанотрещин равна длине d границы. Таким образом, доля n ГЗ с нанотрещинами, способными объединяться с нанотрещинами в соседних границах, равна доле ГЗ, скачок перемещений вдоль которых равен d .

Для приближенного расчета доли n таких ГЗ будем использовать следующие предположения.

- 1) Все ГЗ являются границами наклона.
- 2) ГЗ ориентированы случайным образом относительно оси растяжения.
- 3) Скачки перемещений p вдоль ГЗ могут варьироваться в пределах $0 \leq p \leq d$.
- 4) Скачок перемещений вдоль каждой рассматриваемой ГЗ не зависит от скачков перемещений вдоль других ГЗ и углов, которая эта ГЗ образует с соседними ГЗ, а определяется только ориентацией ГЗ относительно оси растяжения и мощностью дисклинаций диполя, образующегося в этой ГЗ при зернограничном скольжении.
- 5) ГЗ характеризуются некоторым распределением по углам разориентации. Этому распределению соответствует распределение модулей мощностей дисклинаций диполей $\pm\omega$, лежащих в некотором интервале $0 < \omega \leq \omega_{\max}$.

На основе сформулированных предположений в следующем параграфе мы считаем критические условия формирования и слияния зернограничных нанотрещин в процессе межзеренного скольжения.

3. Критические условия формирования и слияния нанотрещин

Рассчитаем теперь условия зарождения в ГЗ нанотрещины длиной d . (Согласно нашим предположениям, такая нанотрещина может сливаться с нанотрещинами в соседних ГЗ.) Для этого рассмотрим ГЗ, в которой в результате зернограничного скольжения образовался дисклинационный диполь. Пусть плоскость ГЗ образует угол θ с осью растяжения, плечо диполя равно p , а мощности дисклинаций диполя равны ω и $-\omega$ (рис. 1). Для оценки равновесного плеча диполя p рассчитаем энергию, связанную с образованием такого диполя. При этом учтем, что внешнее растягивающее напряжение σ создает сдвиговое напряжение $\tau = (\sigma/2) \sin 2\theta$ в плоскости ГЗ (см. рис. 1). Положительным и отрицательным значениям τ соответствуют сдвиги вдоль ГЗ в противоположных направлениях. Поэтому без ограничения общности мы в дальнейшем будем рассматривать ГЗ, для которых τ положительно, то есть $0 \leq \theta \leq \pi/2$.

Будем считать, что наряду со сдвиговым напряжением τ , вызывающим зернограничное скольжение, в материале действуют также внутренние напряжения, не связанные с образованием дисклинационных диполей. Будем предполагать, что при наличии скольжения эти внутренние напряжения не зависят от величины скольжения и характеризуются постоянным сдвиговым напряжением $-\tau_f$. В этом случае при $\tau < \tau_f$ зернограничного скольжения вдоль ГЗ не происходит, а при $\tau > \tau_f$ в плоскости ГЗ действует эффективное сдвиговое напряжение $\tau - \tau_f$, которое вызывает образование дисклинационного диполя на тройном стыке ГЗ. С учетом этого изменение энергии ΔW (на единицу длины дисклинаций), связанное с образованием дисклинационного диполя и зернограничным скольжением, в первом приближении представимо [7] (с исправлением, сделанным в [12]) в виде

$$\Delta W = \frac{D\omega^2 p^2}{2} \left\{ \ln \frac{R}{p} + \frac{3}{2} \right\} - (\tau - \tau_f)pd, \quad \tau > \tau_f, \quad R \gg p. \quad (1)$$

В формуле (1) R – радиус экранирования упругого поля дисклинационного диполя, $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, а ν – коэффициент Пуассона. Первое слагаемое

в этой формуле описывает собственную энергию дисклинационного диполя [13], а второе – работу сдвигового напряжения по зернограничному скольжению.

Будем предполагать, что рост плеча дисклинационного диполя энергетически выгоден, если $\partial\Delta W/\partial p < 0$. Равновесное плечо диполя определяется из уравнения $\partial\Delta W/\partial p = 0$, которое с учетом (1) дает:

$$\tau = \tau_f + \frac{Dp\omega^2}{d} \left(\ln \frac{\kappa d}{p} + 1 \right). \quad (2)$$

В формуле (2) введено обозначение $\kappa = R/d$. Уравнение (2) имеет решение при $\tau_f \leq \tau < \tau_f + D\omega^2\kappa$. При $\tau \leq \tau_f$ скольжения вдоль ГЗ не происходит ($p = 0$), а при $\tau > \tau_f + D\omega^2\kappa$ зернограничное скольжение может идти до тех пор, пока этому не препятствуют соседние тройные стыки ГЗ. Иными словами, при $\tau > \tau_f + D\omega^2\kappa$ скачок перемещений при зернограничном скольжении равен d . Образование дисклинационного диполя с плечом, равным длине ГЗ d , энергетически выгодно, если сдвиговое напряжение τ не меньше сдвигового напряжения, необходимого для образования диполя с равновесным плечом d , то есть при условии

$$\tau \geq \tau_f + D\omega^2 (\ln \kappa + 1). \quad (3)$$

Для простоты будем предполагать, что напряжение τ_f не зависит от угла ориентации ГЗ, по которой происходит зернограничное скольжение. В этом случае можно считать, что с ростом внешнего напряжения зернограничное скольжение начинается вдоль благоприятно ориентированных ГЗ, образующих с осью растяжения углы, близкие к $\pi/4$. При достижении внешним растягивающим напряжением предела текучести $\sigma = \sigma_y$ в этих ГЗ должно выполняться условие $\tau = \tau_f$. Учитывая, что $\tau = (\sigma/2) \sin 2\theta$ и, следовательно, $\tau = \sigma/2$ при $\theta = \pi/4$, получаем, что $\tau_f = \sigma_y/2$.

Теперь, подставляя в неравенство (3) соотношения $\tau_f = \sigma_y/2$ и $\tau = (\sigma/2) \sin 2\theta$, это неравенство можно переписать в виде: $\sin 2\theta \geq f(\omega)$, где $f(\omega) = \sigma_y + 2D\omega^2 (\ln \kappa + 1) / \sigma$. Неравенство $\sin 2\theta \geq f(\omega)$ определяет условие образования в ГЗ дисклинационного диполя с плечом d и, как следствие, условие образования в этой границе нанотрещины, способной сливаться с нанотрещинами в соседних ГЗ.

Рассмотрим теперь условия катастрофического слияния нанотрещин при зернограничном скольжении в НКМ. Для расчета доли n нанотрещин, зарождающихся в ГЗ при зернограничном скольжении, следуя [5,6], введем распределения ГЗ по углам θ и мощностям ω находящихся в них дисклинаций. Будем считать, что плоскости ГЗ ориентированы в пространстве случайным образом, и представим функцию распределения ГЗ по углам $\rho_\theta(\theta)$ в виде $\rho_\theta(\theta) = 2/\pi$, где $0 \leq \theta \leq \pi/2$. Введем обозначение $t = \sin 2\theta$ и перейдем от функции распределения $\rho_\theta(\theta)$ к функции распределения $\rho_t(t)$. Поскольку при $0 < t < 1$ одному значению t соответствует два различных значения угла θ из интервала $0 \leq \theta \leq \pi/2$, функция распределения $\rho_t(t)$ представима в виде

$$\rho_t(t) = \frac{2\rho_\theta(\theta)}{|dt/d\theta|} (t = \sin 2\theta) = \frac{2}{\pi\sqrt{1-t^2}}.$$

Абсолютные значения ω мощности дисклинаций, изменяющиеся в интервале $0 < \omega \leq \omega_{\max}$, будем считать подчиняющимися нормированному бета-распределению $\rho_\omega(\omega)$:

$$\rho_{\omega}(\omega) = \frac{(\omega / \omega_{\max})^{\alpha-1} (1 - \omega / \omega_{\max})^{\beta-1}}{\omega_{\max} B(\alpha, \beta)}, \quad (4)$$

где α и β – постоянные распределения, а $B(\alpha, \beta)$ – бета-функция. Параметр β связан с параметром α и средним значением $\bar{\omega}$ модуля ω мощности дисклинаций соотношением $\beta = \alpha(\omega_{\max} / \bar{\omega} - 1)$. Параметр α при заданном $\bar{\omega}$ определяет дисперсию распределения $\alpha\beta / [(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + 1)]$, уменьшающуюся с ростом α . В рассматриваемом случае $\alpha > 1$ функция распределения $\rho_{\omega}(\omega)$ обращается в ноль при $\omega = 0$ и $\omega = \omega_{\max}$ и в интервале $0 \leq \omega \leq \omega_{\max}$ имеет единственный максимум.

Теперь долю n ГЗ с нанотрещинами, способными сливаться с нанотрещинами в соседних ГЗ, можно рассчитать по формуле [14]

$$n = \int_0^{\omega_{\max}} \rho_{\omega}(\omega) P(t > f(\omega)) d\omega, \quad (5)$$

где $P(t > f(\omega))$ – вероятность того, что $t > f(\omega)$. Вероятность $P(t > f(\omega))$ определяется выражением

$$P(t > f(\omega)) = \Theta(1 - f(\omega)) \int_{f(\omega)}^1 \rho_t(t) dt = \frac{2}{\pi} \Theta(1 - f(\omega)) \arccos f(\omega), \quad (6)$$

где $\Theta(x)$ – функция Хэвисайда, равная 1 при $x > 0$ и 0 при $x < 0$.

Условие $f(\omega) < 1$, необходимое для того, чтобы функция $\Theta(1 - f(\omega))$, входящая в формулу (6), была отлична от нуля, можно переписать в виде $\omega < \omega_c$, где $\omega_c = \sqrt{(\sigma - \sigma_y) / [2D(\ln \kappa + 1)]}$. Подставляя неравенство $\omega < \omega_c$ и формулы (4) и (6) в формулу (5), получаем следующее окончательное выражение для доли n ГЗ с нанотрещинами:

$$n = \frac{2}{\pi \omega_{\max} B(\alpha, \beta)} \int_0^{\min\{\omega_c, \omega_{\max}\}} (\omega / \omega_{\max})^{\alpha-1} (1 - \omega / \omega_{\max})^{\beta-1} \arccos f(\omega) d\omega. \quad (7)$$

Теперь условие образования макротрещины имеет вид: $n > n_c$, где доля n_c “проводящих” нанотрещины ГЗ зависит от формы зерен. Анализ, основанный на теории протекания [10,11], в рассматриваемом случае нанокристаллического твердого тела дает: $n_c \approx 0.125$.

Формула (7) позволяет связать долю n “проводящих” нанотрещины ГЗ с внешним растягивающим напряжением σ и определить критическое напряжение $\sigma_B = \sigma(n = n_c)$, при котором происходит хрупкое разрушение НКМ. Другой важной характеристикой НКМ является величина ε_f деформации до разрушения. В нашем случае эту величину можно определить как деформацию, при которой в НКМ образуется макротрещина: $\varepsilon_f = \varepsilon(n = n_c)$. Для оценки ε_f мы рассчитали зависимость средней деформации $\varepsilon = \varepsilon_{yy}$ НКМ от приложенного напряжения σ . Средняя деформация ε рассчитывается с помощью усреднения деформаций $\varepsilon(t, \omega)$ (где $t = \sin 2\theta$), связанных со скольжением вдоль отдельных ГЗ, по различным ориентациям θ границ зерен и мощностям ω дисклинаций. Окончательное выражение для деформации ε имеет вид:

$$\varepsilon = \frac{2}{\pi \omega_{\max} B(\alpha, \beta)} \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} \int_0^{\omega_{\max}} (\omega / \omega_{\max})^{\alpha-1} (1 - \omega / \omega_{\max})^{\beta-1} \varepsilon(t, \omega) d\omega, \quad (8)$$

где

$$\varepsilon(t, \omega) = \begin{cases} 0, & t \leq \sigma_y / \sigma, \\ \kappa t e^{1+W[-(\sigma t - \sigma_y)/(2\kappa\varepsilon D\omega^2)]}, & \sigma_y / \sigma < t < f(\omega), \\ t, & t \geq f(\omega), \end{cases} \quad (9)$$

а $W(z)$ – специальная функция, являющаяся меньшим из двух корней уравнения $z = W e^W$ при $-1/e < z < 0$.

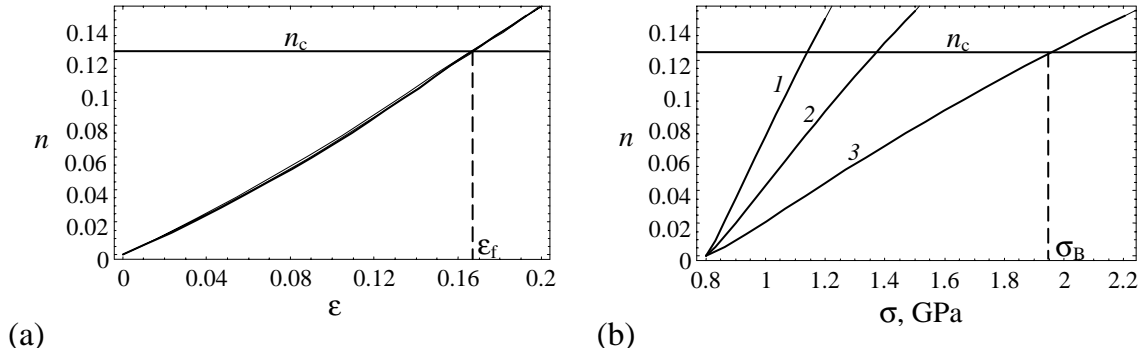


Рис. 2. Зависимости доли n границ зерен, проводящих трещины, в нанокристаллическом Ni от (а) деформации ε и (б) внешнего растягивающего напряжения σ для $\bar{\omega} = 7^\circ, 10^\circ$ и 15° (сливающиеся кривые на рис. (а) и соответственно кривые 1, 2 и 3 на рис. (б)).

С помощью формул (7)–(9) построим зависимости $n(\varepsilon)$ и $n(\sigma)$ для случая нанокристаллического Ni, характеризуемого следующими значениями упругих модулей [15]: $G = 73$ ГПа и $\nu = 0.31$. Мы также положим $\kappa = 3$, $\alpha = 1.5$, $\omega_{\max} = \pi/4$ и $\sigma_y = 0.8$ ГПа. Зависимости $n(\varepsilon)$ и $n(\sigma)$ приведены соответственно на рис. 2,а и 2,б для различных значений параметра $\bar{\omega}$. Горизонтальные линии на этих рисунках показывают значение n_c ($n_c \approx 0.125$). Образование макротрещины возможно в областях, где кривые $n(\varepsilon)$ или $n(\sigma)$ лежат выше горизонтальной прямой $n = n_c$.

Как видно на рис. 2,а, кривые $n(\varepsilon)$, построенные для различных значений среднего модуля мощности дисклинаций $\bar{\omega}$, практически сливаются, то есть при фиксированной деформации ε доля n ГЗ, проводящих трещины, практически не зависит от $\bar{\omega}$. Как следствие, деформация до разрушения ε_f (определяемая точкой пересечения соответствующей кривой $n(\varepsilon)$ с горизонтальной линией $n = n_c$) также не зависит от $\bar{\omega}$. Напротив, при фиксированном внешнем напряжении σ значение n уменьшается с ростом $\bar{\omega}$ (см. рис. 2,б). В результате с увеличением $\bar{\omega}$ увеличивается и предел прочности σ_B НКМ (определяемый точкой пересечения соответствующей кривой $n(\sigma)$ с горизонтальной линией $n = n_c$).

4. Заключение

Таким образом, проведенный анализ показывает, что зернограничное скольжение в деформируемых НКМ с ультрамелкими зернами может приводить к зарождению и последующему слиянию зернограничных нанотрещин. В процессе деформации доля ГЗ с нанотрещинами растет, и при некоторых критических значениях внешнего напряжения и деформации нанотрещины образуют макротрещину, приводящую к катастрофическому разрушению материала. Предел прочности НКМ σ_B (рассчитываемый с помощью формулы (7), выражения для $f(\omega)$ и равенства $\sigma_B = \sigma(n = n_c)$) существенно уве-

личивается при увеличении углов разориентации ГЗ такого материала. Таким образом, для повышения предела прочности нанокристаллических твердых тел необходимо, чтобы они содержали преимущественно большеугловые ГЗ с высокими углами разориентации.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (контракт 02.513.11.3190 Программы “Индустрия наносистем и материалов” и грант Президента РФ МК-1702.2008.1), Программ РАН “Структурная механика материалов и элементов конструкций” и “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов”, а также Российского фонда фундаментальных исследований (грант 08-01-00225-а).

Литература

- [1] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [2] I.A. Ovid'ko // *J. Mater. Sci.* **42** (2007) 1694.
- [3] Г.П. Черепанов, *Механика хрупкого разрушения* (Наука, М., 1974).
- [4] Н.Ф. Морозов, *Математические вопросы теории трещин* (Наука, М., 1984).
- [5] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, Yu.V. Petrov, A.G. Sheinerman // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **4** (2003) 65.
- [6] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, Ю.В. Петров, А.Г. Шейнерман // *ДАН* **406** (2006) 480.
- [7] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 171927.
- [8] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phys. Rev. B* **77** (2008) 054109.
- [9] И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман // *ФТТ* **50** (2008) 1002.
- [10] J.P. Clerc, G. Giraud, J.M. Laugier, J.M. Lucks // *Adv. Phys.* **39** (1990) 191.
- [11] M. Sahimi, *Applications of Percolation Theory* (Taylor and Francis, London, 1994).
- [12] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **57** (2009) 2217.
- [13] В.И. Владимиров, А.Е. Романов, *Дисклинации в кристаллах* (Наука, Л., 1986).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц, *Статистическая физика. Часть 1* (Физматлит, М., 2005).
- [15] C.J. Smithells, T.A. Brands, *Metals Reference Book* (Butterworth, London, 1976).