

ЗАРОЖДЕНИЕ НАНОЗЕРЕН, НАНОМАСШТАБНАЯ АМОРФИЗАЦИЯ И ТРАНСФОРМАЦИИ ДИСКЛИНАЦИЙ В ДЕФОРМИРУЕМЫХ НАНОМАТЕРИАЛАХ

С.В. Бобылев, И.А. Овидько*

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

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

Аннотация. Построены теоретические модели, описывающие микромеханизмы зарождения наноскопических зерен и наномасштабной аморфизации в деформируемых нанокристаллических материалах. В рамках моделей зарождение нанозерен и наномасштабная аморфизация инициируются процессами пластической деформации и связываются с трансформациями диполей и квадруполей дисклинаций (ротационных дефектов) на границах зерен. Зарождение нанозерен происходит в результате расщепления и миграции границ зерен, содержащих дисклинационные диполи, а наномасштабная аморфизация реализуется путем трансформации дисклинационных квадруполей. Показано, что процессы зарождения нанозерен в деформируемых нанокристаллических материалах (в частности, нанокристаллическом Al и нанокерамике α -Al₂O₃), а также наномасштабная аморфизация в деформируемом нанокристаллическом Si энергетически выгодны в определенных диапазонах их параметров и уровня внешнего напряжения.

Ключевые слова: нанокристаллические материалы, нанозерна, дисклинации, аморфизация

1. Введение

Согласно экспериментальным данным, компьютерным расчетам и теоретическим моделям, нано- и поликристаллические материалы, деформируемые при очень высоких уровнях механических напряжений, зачастую проявляют необычные свойства [1–32]. Особый интерес представляют явления индуцированного пластической деформацией измельчения зеренной структуры до наноскопических размеров (нанокристаллизация) [1–4] и индуцированной деформацией аморфизации (переход из кристаллического в аморфное состояние) в материалах под действием ударных нагрузок, индентирования, измельчения в шаровых мельницах [5–11]. Индуцированную деформацией нанокристаллизацию обычно связывают с непрерывной эволюцией дислокационного ансамбля, которая приводит к последовательному образованию дислокационных границ субзерен, ячеистой структуры и большеугловых границ зерен (ГЗ) [1–4]. Однако, работы по компьютерному моделированию [24–26] показали возможность зарождения нанозерен в наноматериалах (с металлическими и ковалентными межатомными связями) в процессе пластической деформации путем расщепления и миграции ГЗ вблизи тройных стыков. Вместе с тем, микромеханизм и движущие силы зарождения нанозерен в работах [24–26] не были идентифицированы.

Процессы аморфизации в твердых телах обычно управляются химическими факторами [5,6]. В тоже время, известны примеры, когда химические факторы не работают, а главной движущей силой аморфизации являются высокие уровни напряжений и упругих деформаций [7,10–12,20]. Например, экспериментально наблюдаемое образование внутризеренных аморфных полос, которые развиваются параллельно выделенным кристаллографическим плоскостям в поликристаллах V_4C при ударном нагружении, можно связать с потерей устойчивости кристаллической решетки из-за резкого снижения сдвиговой прочности [11]. В других случаях пластическая деформация крупнозернистых поликристаллов может приводить к генерации ансамбля дефектов (точечных дефектов, дислокаций, двойников и границ субзерен) очень высокой плотности. В этих условиях возможна локальная аморфизация за счет того, что энергия кристаллической структуры с дефектами в некоторых локальных областях материала превышает энергию аморфной фазы [21]. Следует отметить, что зарождение и эволюция дефектов структуры в нанокристаллических материалах существенно отличаются от таковых в крупнозернистых поликристаллах [8,9,12–19,33,34]. (Это обусловлено специфическими структурными особенностями нанокристаллических материалов, прежде всего, наноскопическими размерами зерен (кристаллитов) и высокой объемной долей (до 10-20%), занимаемой ГЗ в таких материалах [1–3,27].) Например, плотность точечных дефектов и дислокаций внутри зерен обычно очень мала, поскольку ГЗ эффективно поглощают точечные дефекты [33,34] и решеточные дислокации [15,18]. Это задает отличие между процессами аморфизации в нано- и поликристаллических материалах, а также обуславливает значимый интерес к выявлению (специфических для наноструктуры) микромеханизмов экспериментально наблюдаемой [16,20] аморфизации в деформируемых наноматериалах.

Основной целью настоящей работы является разработка теоретического описания специфических для наноматериалов микромеханизмов зарождения нанозерен и аморфизации при пластической деформации. Следуя кратко обсуждавшемуся ранее представлению [9,35], мы связываем оба процесса с трансформациями зернограничных дисклинаций – дефектов, которые интенсивно формируются в поликристаллах и, особенно, в наноматериалах, деформируемых при высоких уровнях механических напряжений.

2. Зернограничные дисклинации – типичные дефекты, формируемые в наноматериалах в процессе пластической деформации

Обсудим кратко представления о клиновых дисклинациях, которые являются типичными дефектами структуры, образующимися в наноматериалах в процессе пластической деформации. Клиновая дисклинация представляет собой ротационный линейный дефект, который обычно расположен либо на ГЗ, либо в тройном стыке ГЗ, и характеризуется дисклинационной мощностью – невязкой поворота кристаллической решетки при обходе вокруг линии дисклинации [36,37]. Например, клиновая дисклинация на границе наклона (самый распространенный тип ГЗ) является линией, разделяющей фрагменты такой границы с разными углами разориентировки. Разность этих углов равна мощности дисклинации. Клиновая дисклинация присутствует в тройном стыке границ наклона, если сумма углов разориентировок этих ГЗ не равна нулю (при этом суммирование осуществляется путем обхода контура, охватывающего тройной стык, по часовой стрелке [36–38]). Мощность дисклинации в данном случае равна ненулевой сумме углов разориентировок ГЗ.

Существует несколько механизмов образования дисклинаций при пластической деформации наноматериалов (рис. 1). Например, образование диполей и квадруполей зернограничных дисклинаций может быть инициировано миграцией ГЗ (способной

вносить существенный вклад в пластическую деформацию наноматериалов при определенных условиях [14,39–47]) под действием приложенного напряжения (рис. 1,*b*).

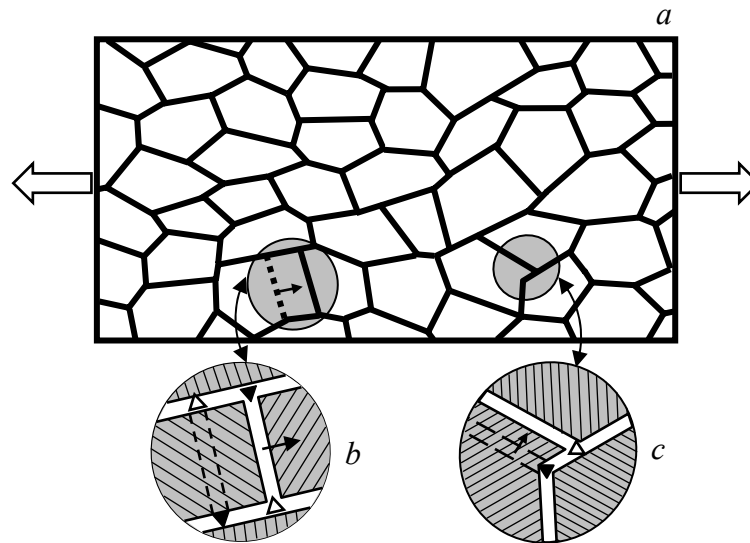


Рис. 1. Механизмы формирования клиновых дисклинаций на ГЗ и в тройных стыках в деформируемом наноматериале. (*a*) Нанокристаллический образец под действием приложенного растягивающего напряжения. Выносы показывают формирование дисклинационных конфигураций в результате (*b*) миграции ГЗ, индуцированной приложенным напряжением и (*c*) зернограничного проскальзывания с сопутствующим смещением тройного стыка ГЗ.

Также диполи зернограничных дисклинаций могут образовываться в поликристаллах и наноматериалах вследствие межзеренного проскальзывания (которое доминирует, в частности, при сверхпластической деформации [2,15,18]); см. рис. 1,*c*. Следуя [17], межзеренное проскальзывание в тройном стыке ГЗ создает дисклинационный диполь на фрагменте ГЗ, вдоль которого сдвигается тройной стык (рис. 2,*a,b*). Проскальзывание вдоль горизонтальной ГЗ вызывает смещение как тройного стыка (из положения В в положение А), так и вертикальной ГЗ, которая полагается симметричной границей наклона с разориентировкой ω_0 . Смещение тройного стыка из точки В в точку А (рис. 2,*b*) приводит к возникновению скачков параметров (углов) разориентировки горизонтальной ГЗ. Эти скачки равны по величине ω_0 в тройном стыке А и $-\omega_0$ в двойном стыке В [17]. Как следствие, в точках А и В присутствуют клиновые дисклинации, характеризующиеся мощностями $\pm\omega_0$ и формирующие дипольную конфигурацию (рис. 2,*b*) [17].

3. Зарождение нанозерен путем расщепления и миграции границ зерен в деформируемых наноматериалах

Диполь зернограничных дисклинаций способен двигаться под действием приложенного напряжения, вызывая ротационную деформацию (пластическую деформацию, сопровождающуюся поворотами кристаллической решетки) материала [36,48]. Также зернограничные дисклинации имеют склонность к расщеплению, поскольку это понижает их упругую энергию [36,49]. В результате комбинации этих процессов диполь зернограничных дисклинаций может двигаться и расщепляться, приводя к зарождению нанозерна (нанозерно IV), как показано на рис. 2,*c*.

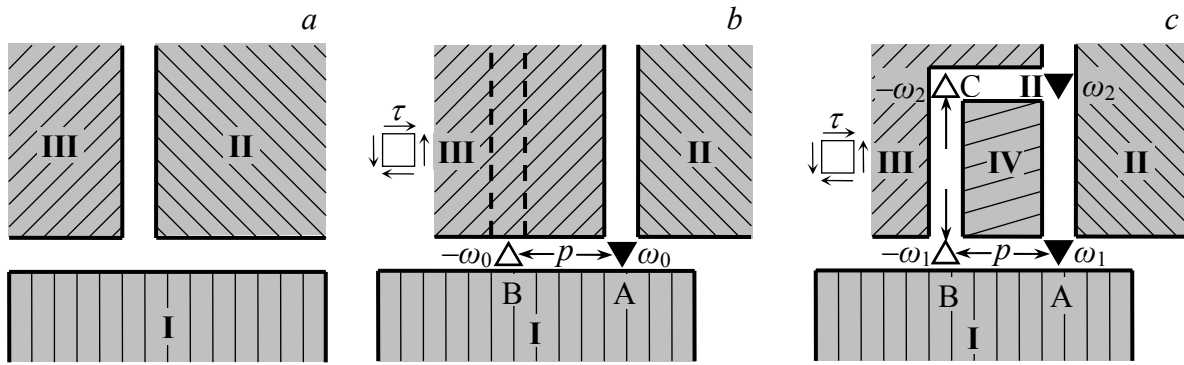


Рис. 2. Структура дефектов, эволюция которой приводит к зарождению нанозерна. (a) Исходное состояние. (b) Миграция тройного стыка ГЗ в результате межзеренного проскальзывания, представляемая в рамках дисклинационной модели как зарождение диполя клиновых дисклинаций АВ. (c) Расщепление дисклинационного диполя с образованием двух новых диполей дисклинаций, приводящее к зарождению нового нанозерна IV.

Рассмотрим подробнее эволюцию дисклинационного диполя на рис. 2, b, c. Обозначим расстояние между дисклинациями исходного диполя (рис. 2, b) как p . В рамках нашей модели нанозерно IV зарождается путем расщепления ГЗ АВ на неподвижную ГЗ АВ и подвижную ГЗ CD (рис. 2, b, c). В общем случае расщепление ГЗ сопровождается расщеплением исходного диполя дисклинаций с мощностями ω_0 и $-\omega_0$ (дисклинаций, расположенных в точках А и В соответственно; см. рис. 2, b) на два диполя: неподвижный диполь зернограничных дисклинаций с мощностями ω_1 и $-\omega_1$ (расположенных в точках А и В соответственно) и подвижный диполь зернограничных дисклинаций с мощностями ω_2 и $-\omega_2$ (расположенных в точках С и D соответственно); см. рис. 2, c. Для определенности выберем разориентировки новых ГЗ (ГЗ, сформировавшихся в процессе зарождения нанозерна) (рис. 2, c) так, чтобы сохранялась суммарная дисклинационная мощность в процессе расщепления: $\omega_0 = \omega_1 + \omega_2$. Диполь CD продвигается в зерно III на расстояние q . Кристаллическая решетка в области ABCD, заматаемая движущейся ГЗ CD, разориентирована относительно решеток зерен I, II и III (рис. 2, c). Следовательно, область ABCD представляется собой новое нанозерно IV, чье образование связано с движением дисклинационного диполя CD, в то время как движение диполя производит пластическую деформацию в области ABCD. Это позволяет нам рассматривать образование нанозерна (рис. 2, c) как особый микромеханизм пластической деформации в наноматериалах.

4. Энергетические характеристики зарождения нанозерна путем расщепления и миграции границ зерен в деформируемых наноматериалах

Проведем расчет изменения энергии ΔW , характеризующего процесс зарождения нанозерна, т.е. разницы энергий системы после и до расщепления ГЗ и зернограничных дисклинаций (рис. 2, b и 2, c соответственно). Изменение энергии ΔW (на единицу длины линии дисклинации, перпендикулярной плоскости рис. 2, b, c) записывается в виде суммы следующих слагаемых:

$$\Delta W = W_{el}^{\omega_1} + W_{el}^{\omega_2} - W_{el}^{\omega_0} + W_{int} - A + \Delta W_{gb}, \quad (1)$$

где $W_{el}^{\omega_0}$, $W_{el}^{\omega_1}$, $W_{el}^{\omega_2}$ собственные упругие энергии диполей клиновых дисклинаций с мощностями $\pm \omega_0$, $\pm \omega_1$, $\pm \omega_2$ соответственно, W_{int} – энергия взаимодействия образующихся при расщеплении ω_1 - и ω_2 -диполей, A – работа внешнего напряжения τ по

перемещению ω_2 -диполя, а ΔW_{gb} изменение энергии ГЗ из-за расщепления ГЗ, которое сопутствует зарождению нанозерна IV.

Собственные упругие энергии диполей находятся по известной формуле [36] и записываются в виде:

$$W_{el}^{\omega_i} = \frac{D\omega_i^2 p^2}{2} \left(\ln \frac{R}{p} + \frac{1}{2} \right), \quad i = 0,1,2, \quad (2)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, R – радиус экранирования упругих полей диполя. Для расчета энергии взаимодействия W_{int} воспользуемся стандартной схемой вычисления энергии как работы по зарождению одного дисклинационного диполя в поле другого дисклинационного диполя [36,50]. В результате получаем:

$$W_{int} = D\omega_1\omega_2 \left(\frac{p^2 + q^2}{2} \ln \frac{R^2}{p^2 + q^2} - q^2 \ln \frac{R}{q} + \frac{p^2}{2} \right). \quad (3)$$

Работа внешнего напряжения τ по перемещению ω_2 -диполя может быть найдена таким же способом [36,50] в виде:

$$A = \tau\omega_2 pq. \quad (4)$$

Подставляя найденные выражения (2)–(4) в формулу (1), получаем:

$$\Delta W = \frac{D\omega_1\omega_2}{2} \left(p^2 \ln \frac{p^2}{p^2 + q^2} + q^2 \ln \frac{q^2}{p^2 + q^2} \right) - \tau\omega_2 pq + \Delta W_{gb}. \quad (5)$$

Найдем теперь изменение энергии ΔW_{gb} (на единицу длины линии дисклинации перпендикулярной плоскости рис. 2,с) в результате зарождения нанозерна IV. Для простоты в настоящей работе мы ограничимся рассмотрением симметричных границ наклона, которые представляют собой типичные ГЗ для широкого круга материалов. Большеугловые ГЗ можно разделить на два типа: *обычные* и *специальные* ГЗ с большими и малыми значениями удельной поверхностной энергии γ_{gb} соответственно [51]. Для большинства материалов зависимость энергии γ_{gb} от угла разориентировки θ является медленно возрастающей или приблизительно постоянной функцией для обычных ГЗ при углах $\theta > 15^\circ$ с резкими провалами в некоторых узких диапазонах углов θ , соответствующих специальным ГЗ [51]. Для простоты в настоящей работе мы ограничимся рассмотрением большеугловых ГЗ с разориентировками $\theta > 15^\circ$ и будем полагать, что зависимость $\gamma_{gb}(\theta)$ принимает постоянное значение γ_0 для всех углов θ , соответствующих обычным ГЗ, и значение $\gamma_1 < \gamma_0$ для углов θ , соответствующих специальным ГЗ. Величина γ_1 , как правило, в несколько раз меньше γ_0 [51].

С учетом существенной разницы энергий обычной и специальной ГЗ, рассмотрим два принципиально разных варианта зарождения нанозерна: (1) все ГЗ, задействованные в процессе его зарождения, являются обычными; (2) при зарождении нанозерна возникают одна или несколько специальных ГЗ. (Вместе с тем, мы не будем рассматривать ситуацию, когда одна или обе исходные границы АВ и АД (рис. 2,с) являются специальными, поскольку их разориентировка изменяется в процессе зарождения нанозерна, и, в общем случае, они трансформируются в обычные ГЗ. Такая трансформация приводит к увеличению энергии ΔW_{gb} , что затрудняет протекание исследуемого процесса.) В первом случае, с учетом наших предположений о виде зависимости $\gamma_{gb}(\theta)$, суммарная энергия исходных ГЗ АВ и АД не изменяется, и образуется две новых гра-

ницы BC и CD с длинами q и p соответственно. Поскольку удельная энергия новых границ наклона BC и CD равна γ_0 , изменение энергии ΔW_{gb} оценивается как:

$$\Delta W_{gb} = \gamma_0(p + q). \quad (6)$$

Рассмотрим теперь второй вариант зарождения нанозерна, при котором одна или несколько зарождающихся ГЗ являются специальными. В компьютерной модели [24] пластической деформации нанокристаллического Al было обнаружено зарождение нанозерна с двумя обычными и двумя специальными (двойниковыми) ГЗ. Для нашего случая (рис. 2,с) специальными ГЗ являются границы BC и CD. Для определенности, далее мы будем рассматривать именно такой вариант зарождения нанозерна с двумя обычными и двумя специальными ГЗ BC и CD (рис. 2,с). При этом изменение энергии ΔW_{gb} представляется в виде:

$$\Delta W_{gb} = \gamma_1(p + q). \quad (7)$$

Полное изменение энергии системы ΔW , характеризующее зарождение нанозерна, находится с помощью формулы (5) и формул (6) и (7) в зависимости от выбранного варианта зарождения.

Очевидно, что зарождение нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ существенно выгоднее с точки зрения выигрыша в энергии системы по сравнению с зарождением нанозерна со всеми обычными ГЗ при прочих одинаковых параметрах. Однако наличие двух специальных ГЗ прямо указывает на то, что разориентировки ГЗ, вовлеченных в процесс расщепления, и мощности дисклинаций должны удовлетворять некоторым условиям, т.е. такой процесс возможен не для любых ГЗ. Эти условия являются следствием правила Кирхгоффа [37] для стыков ГЗ. В частности, это означает, что сумма разориентировок ГЗ, сходящихся в стыке, равна мощности клиновой дисклинации, находящейся в этом стыке [36–38]. Детальный анализ ограничений, накладываемых правилом Кирхгоффа [37] для стыков ГЗ, выходит за рамки настоящей работы.

Таким образом, зарождение нанозерен со специальными и обычными ГЗ более выгодно энергетически по сравнению с нанозернами только с обычными ГЗ при прочих одинаковых параметрах, но накладывает определенные ограничения на разориентировки ГЗ и мощности дисклинаций. С другой стороны, зарождение нанозерен со всеми обычными ГЗ является более универсальным механизмом, поскольку возможно на любой ГЗ. Вместе с тем, зарождение нанозерен со всеми обычными ГЗ характеризуется более высокой энергией по сравнению со случаем нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ при прочих одинаковых параметрах. Представляет интерес определение критических уровней механических напряжений, при которых реализуются рассматриваемые варианты зарождения нанозерен.

5. Расчет характеристик зарождения нанозерна в деформируемых наноматериалах

Вычислим изменение энергии ΔW (по формуле (5)) на примере таких материалов как нанокристаллический Al (алюминий) и нанокерамика $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (сапфир). Для этих материалов типичны следующие значения параметров: для Al – $G = 26.5$ GPa, $\nu = 0.34$ [52]; для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ – $G = 169$ GPa, $\nu = 0.23$ [53]. Положим размер зерна (используемый в качестве верхней границы для параметров p и q) $d = 15$ nm. Для Al зависимость удельной энергии γ_{gb} ГЗ от угла ее разориентировки для симметричной границы наклона типа [110] была экспериментально измерена в работах [54,55]. Согласно [54,55] удельная энергия γ_0 обычной (неспециальной) большеугловой ($\theta > 15^\circ$) ГЗ практически не зависит от угла разориентировки θ и составляет $\gamma_0 \approx 0.4$ J/m². Вместе с тем, на зависимости

$\gamma_{gb}(\theta)$ обнаруживаются два резких провала, соответствующие двойниковым ГЗ с углами разориентировки 70.5° и 129.5° , энергии которых равны 0.1 и 0.2 J/m^2 соответственно. Для определенности ограничимся рассмотрением двойниковой ГЗ с углом 70.5° , т.е. положим для Al $\gamma_1 = 0.1 \text{ J/m}^2$.

Аналогично для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ в работе [56] экспериментально определена зависимость $\gamma_{gb}(\theta)$ для симметричной границы наклона типа [0001]. В случае обычных большеугловых ГЗ зернограничная энергия изменяется в пределах $0.4\text{--}0.7 \text{ J/m}^2$ [56]. Для определенности положим $\gamma_0 = 0.5 \text{ J/m}^2$ для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Также в [56] идентифицированы две специальные ГЗ, одна из которых является двойниковой границей (угол разориентировки 60°) с энергией $\gamma_1 = 0.05 \text{ J/m}^2$. Это значение энергии γ_1 мы и будем использовать в наших расчетах.

На рис. 3 и 4 построены типичные зависимости $\Delta W(q)$ в Al и $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ соответственно для разных значений параметров задачи (см. подписи к рисункам). Расчет выполнен для расщепления исходного дисклинационного диполя на два диполя равной мощности, т.е. $\omega_1 = \omega_2 = 0.5\omega_0$. Рис. 3,а–с и 4,а–с соответствуют зарождению нанозерен с обычными ГЗ, энергия ΔW_{gb} которых рассчитывается по формуле (6), а рис. 3,д–f и 4,д–f соответствуют нанозернам со специальными и обычными ГЗ (ΔW_{gb} рассчитывается по формуле (7)). Рис. 3 и 4 показывают очевидные тенденции роста энергетической выгоды процесса образования нанозерна с увеличением параметров τ , p , ω_0 . Также, согласно зависимостям, представленным на рис. 3 и 4, образование нанозерна со специальными и обычными ГЗ выгоднее энергетически по сравнению с нанозерном со всеми обычными ГЗ.

В наших расчетах мы исключаем из рассмотрения диапазон значений $q < 2 \text{ nm}$, поскольку в этом случае дисклинационные дефекты располагаются друг от друга на столь малых расстояниях, что анализ их характеристик в рамках линейной теории упругости требует корректировки. Анализ процесса расщепления в этом диапазоне значений параметров задачи может быть выполнен другими методами (например, с помощью нелинейной теории упругости или моделирования методами молекулярной динамики) и выходит за рамки настоящей работы. С другой стороны, в диапазоне $q \geq 2 \text{ nm}$ выигрыш в упругой энергии системы является необходимым условием для осуществления расщепления, поскольку начальная стадия процесса (при $q < 2 \text{ nm}$) может осуществиться за счет термофлуктуационного зарождения ступенек на исходной ГЗ при условии, что расщепление ГЗ энергетически выгодно при $q \geq 2 \text{ nm}$. Учитывая это, мы ограничимся анализом диапазона значений $p, q \geq 2 \text{ nm}$. Зарождение нанозерна IV (рис. 2,с) характеризуется отсутствием энергетического барьера при выполнении следующих условий:

$$\Delta W(q = 2 \text{ nm}) \leq 0, \quad (8)$$

$$\left. \frac{\partial(\Delta W)}{\partial q} \right|_{q=2\text{nm}} \leq 0. \quad (9)$$

Зарождение нанозерна IV (рис. 2,с) может осуществляться безбарьерным путем, если приложенное напряжение достигает некоторого критического значения τ_c . Последнее определяется как минимальное напряжение, при котором выполняются оба неравенства (8) и (9). Используя формулы (5), (6), (8) и (9), после элементарных преобразований мы

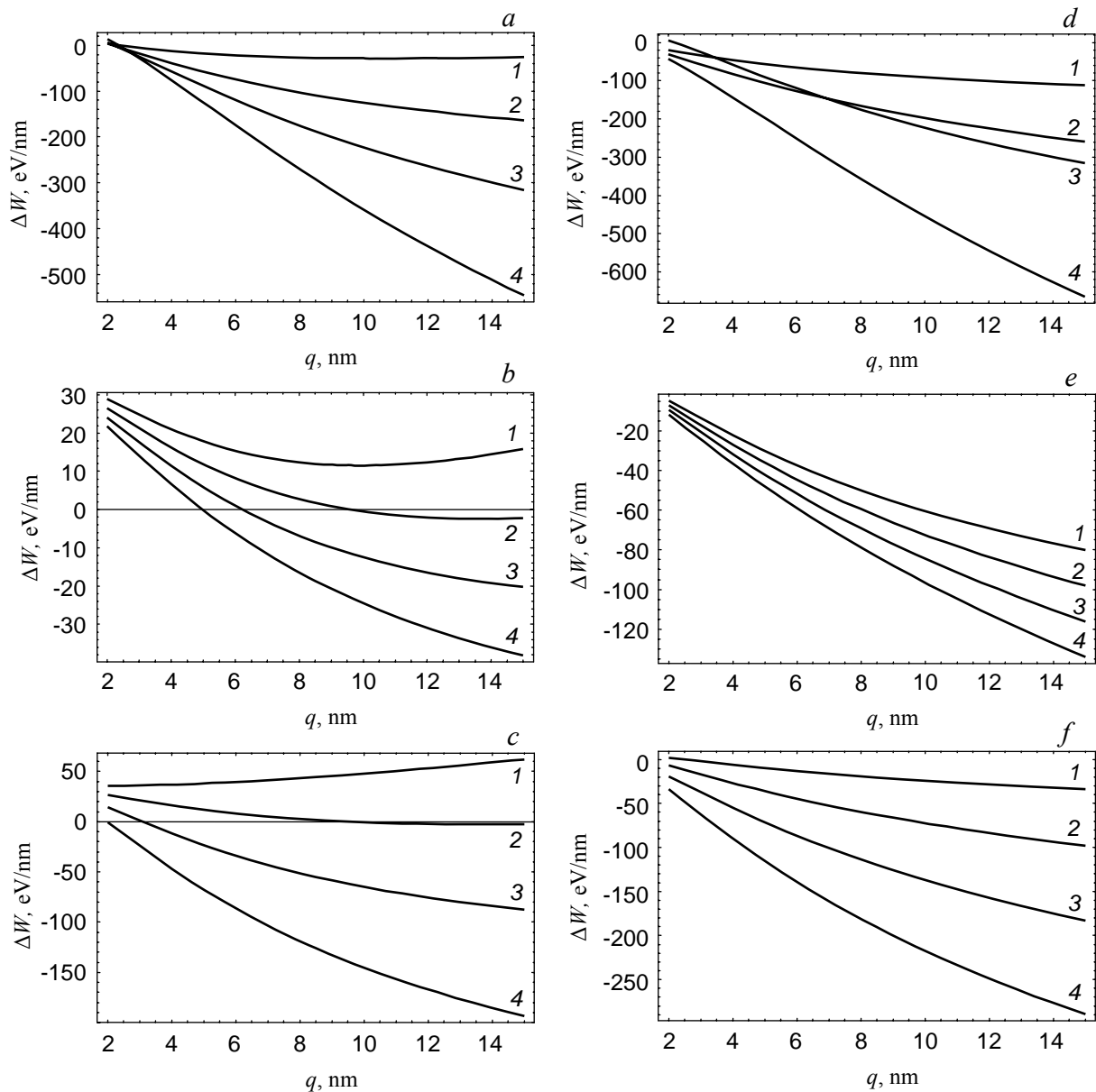


Рис. 3. Зависимости изменения энергии системы ΔW в результате расщепления дисклинационного диполя от параметра q , рассчитанные для нанокристаллического Al в случае зарождения нанозерна с обычными ГЗ, $\omega_1 = \omega_2 = 0.5\omega_0$ и разных значений параметров задачи. (a) $\tau = 0.1$ GPa, $\omega_0 = 0.5$, кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $p = 3, 5, 7$ и 10 nm; (b) $p = 5$ nm, $\omega_0 = 0.3$, кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\tau = 0.1, 0.2, 0.3$ и 0.4 GPa; (c) $p = 5$ nm, $\tau = 0.2$ GPa, кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.2, 0.3, 0.4$ и 0.5 . (d), (e), (f) Зависимости $\Delta W(q)$ построены для тех же значений параметров, что и (a), (b), (c) соответственно, но для случая зарождения нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ.

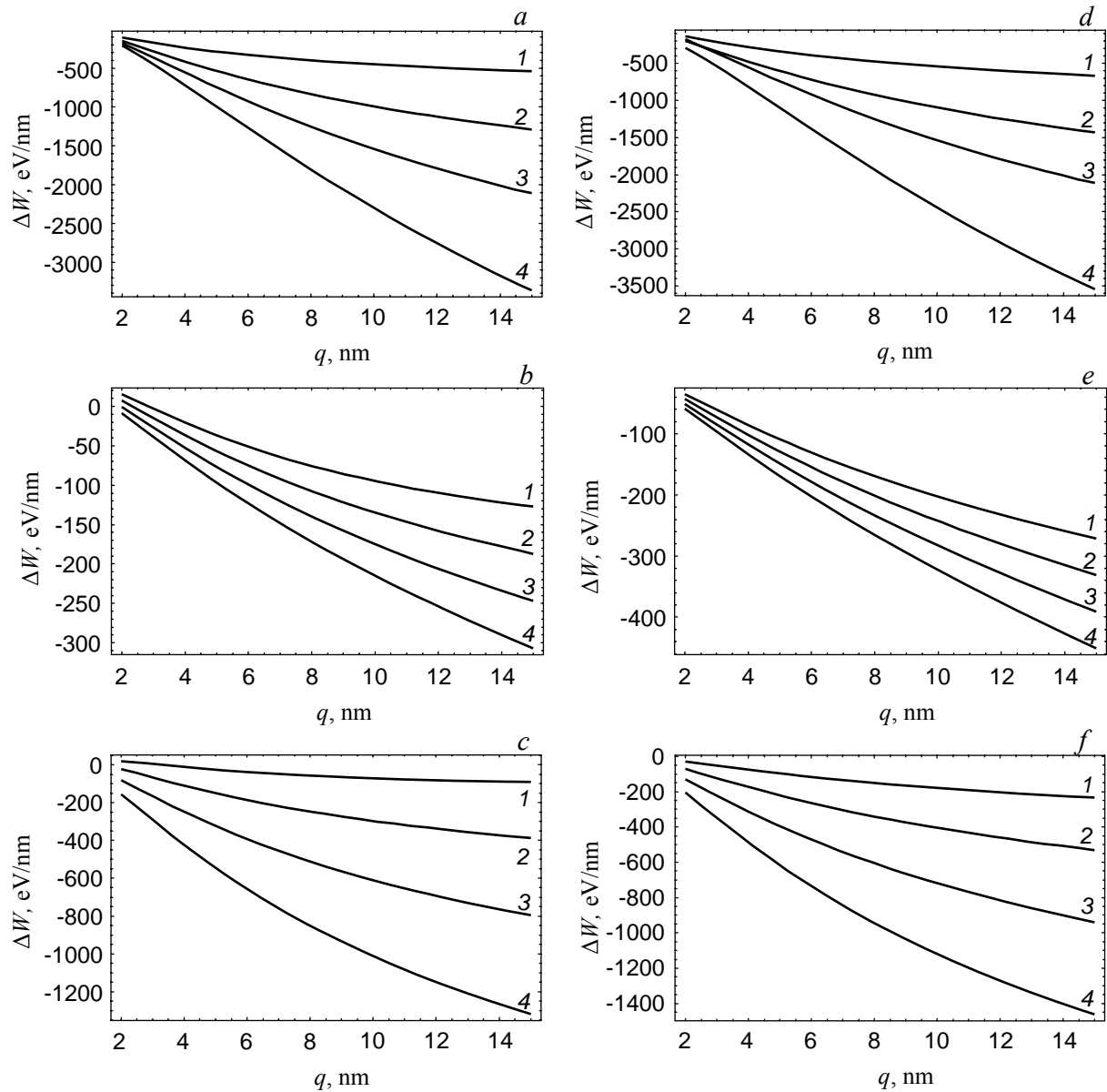


Рис. 4. Зависимости изменения энергии системы ΔW в результате расщепления дисклинационного диполя от параметра q , рассчитанные для нанокристаллического α - Al_2O_3 в случае зарождения нанозерна с обычными ГЗ, $\omega_1 = \omega_2 = 0.5\omega_0$ и разных значений параметров задачи. (a) $\tau = 0.1$ GPa, $\omega_0 = 0.5$, кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $p = 3, 5, 7$ и 10 nm. (b) $p = 5$ nm, $\omega_0 = 0.2$, кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\tau = 0.5, 1.0, 1.5$ и 2.0 GPa. (c) $p = 5$ nm, $\tau = 0.2$ GPa, кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.2, 0.3, 0.4$ и 0.5 . (d), (e), (f) Зависимости $\Delta W(q)$ построены для тех же значений параметров, что и (a), (b), (c) соответственно, но для случая зарождения нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ.

получаем выражение для критического напряжения τ_c , при котором реализуется безбарьерное зарождение нанозерна со всеми обычными ГЗ (в реалистичном диапазоне значений параметров нанокристаллических Al и Al₂O₃):

$$\tau_c = \left[\frac{D\omega_1}{2} \left(\frac{p}{q} \ln \frac{p^2}{p^2 + q^2} + \frac{q}{p} \ln \frac{q^2}{p^2 + q^2} \right) + \frac{\gamma_0(p+q)}{\omega_2 pq} \right]_{q=2\text{nm}} \quad (10)$$

В случае зарождения нанозерна со специальными и обычными ГЗ в формуле (10) γ_0 следует заменить на γ_1 .

На рис. 5 и 6 построены кривые зависимостей критического напряжения τ_c от различных параметров модели для Al и α -Al₂O₃ соответственно. Рис. 5,*a,b* и 6,*a,b* соответствуют зарождению нанозерна со всеми обычными ГЗ, а рис. 5,*c,d* и 6,*c,d* – со специальными и обычными ГЗ. В данном случае снова рассматривалось расщепление вида $\omega_1 = \omega_2 = 0.5\omega_0$. Из кривых на рис. 5 и 6 видно, что критическое напряжение τ_c сравнительно слабо зависит от параметра p , и, напротив, весьма значительно от мощности

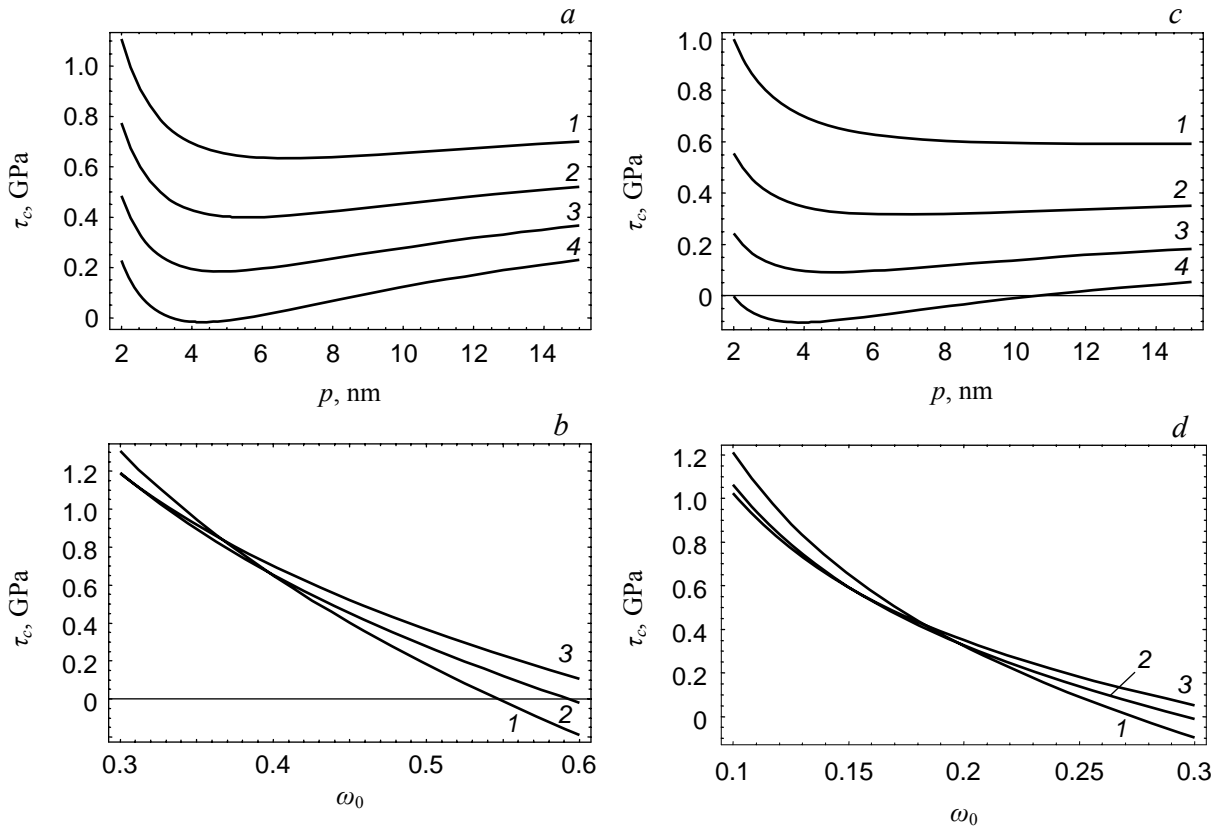


Рис. 5. Зависимости критического напряжения τ_c , обеспечивающего безбарьерное зарождение нанозерна в нанокристаллическом Al, от: (a) параметра p в случае зарождения нанозерна с обычными ГЗ (кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.4, 0.45, 0.5$ и 0.55); (b) параметра ω_0 в случае зарождения нанозерна с обычными ГЗ (кривые 1, 2 и 3 соответствуют значениям $p = 5, 10$ и 15 nm); (c) параметра p в случае зарождения нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ (кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.15, 0.2, 0.25$ и 0.3); (d) параметра ω_0 в случае зарождения нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ (кривые 1, 2 и 3 соответствуют значениям $p = 5, 10$ и 15 nm).

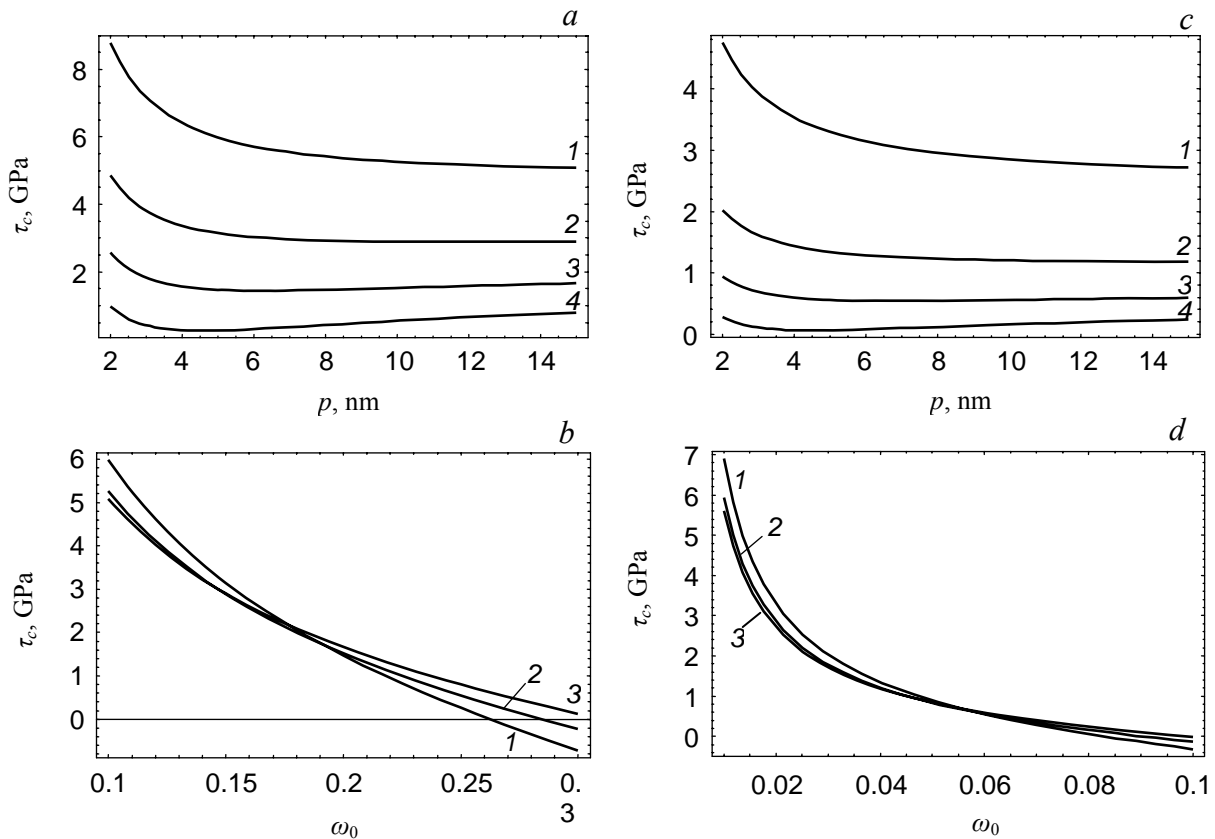


Рис. 6. Зависимости критического напряжения τ_c , обеспечивающего безбарьерное зарождение нанозерна в нанокристаллическом $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, от: (a) параметра p в случае зарождения нанозерна с обычными ГЗ (кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.1, 0.15, 0.2$ и 0.25); (b) параметра ω_0 в случае зарождения нанозерна с обычными ГЗ (кривые 1, 2 и 3 соответствуют значениям $p = 5, 10$ и 15 nm); (c) параметра p в случае зарождения нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ (кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.02, 0.04, 0.06$ и 0.08); (d) параметра ω_0 в случае зарождения нанозерна с двумя специальными и двумя обычными ГЗ (кривые 1, 2 и 3 соответствуют значениям $p = 5, 10$ и 15 nm).

ω_0 исходного дисклинационного диполя. Также из рис. 5,*b* видно, что для $\omega_0 > 0.5$ критическое напряжение τ_c для зарождения нанозерна без специальных границ ниже величины $\tau \approx 0.3$ GPa, которая реально достижима в нанокристаллическом Al. Аналогично, на основании рис. 6,*b* можно сделать вывод, что в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ при $\omega_0 > 0.15$ критическое напряжение τ_c становится меньше величины $\tau \approx 3.5$ GPa, которая реально достижима в нанокристаллическом $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. В случае зарождения нанозерна со специальными и обычными ГЗ соответствующие значения ω_0 , при которых τ_c имеет величину, реально достижимую в материале, становятся еще ниже. В Al (рис. 5,*d*) реалистичные значения τ_c наблюдаются при $\omega_0 > 0.2$, в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (рис. 6,*d*) – при $\omega_0 > 0.02$.

Необходимо отметить, что кривые на рис 5с, 5d и 6с, 6d, соответствующие нанозерну со специальными ГЗ, формально построены в диапазоне значений ω_0 . Тем не менее, выше (см. раздел 2.1) отмечалось, что при зарождении нанозерна со специальными границами на разориентировку исходной границы и мощности дисклиаций наклады-

ваются определенные условия. Поскольку величина ω_0 зависит от разориентировок ГЗ, то и она, вообще говоря, должна иметь некоторую фиксированную величину (по крайней мере, при условии $\omega_1 = \omega_2 = 0.5\omega_0$). Однако связь мощностей дисклинаций с углами разориентировок ГЗ неоднозначна и зависит, в том числе, от механизма зарождения исходного диполя. Как следствие, выразить эту зависимость в виде универсальной формулы не представляется возможным. Каждый конкретный случай нужно анализировать отдельно. В этих условиях зависимости, представленные на рис. 5 и 6, весьма полезны, поскольку их можно использовать всегда, выбирая подходящее к данной конфигурации значение ω_0 .

Также следует заметить, что с ростом ω_0 критическое напряжение τ_c способно уменьшаться до отрицательных величин, что вполне очевидно вытекает из формулы (10), первое слагаемое которой всегда отрицательно и уменьшается с ростом ω_0 (при условии $\omega_1 = 0.5\omega_0$). Подобное поведение обусловлено тем, что выигрыш в упругой энергии системы в результате расщепления ω_0 -диполя нарастает пропорционально ω_0^2 . Отрицательное значение τ_c означает, что процесс расщепления осуществляется самопроизвольно даже при противодействующем приложенном напряжении. В этом случае зарождение нанозерна контролируется механизмом, приводящим к возникновению исходного дисклинационного диполя.

Вариант расщепления $\omega_1 = \omega_2 = 0.5\omega_0$, который использовался для расчетов выше, является наиболее выгодным с точки зрения выигрыша в упругой энергии дисклинационных диполей при отсутствии внешнего напряжения. Если же внешнее напряжение τ приложено, то более выгодной становится конфигурация, в которой $\omega_2 > \omega_1$. Этот факт проиллюстрирован на рис. 7, где показаны зависимости параметра ω_2/ω_0 , соответствующего максимальному энергетическому выигрышу системы при расщеплении дисклинационного диполя от величины внешнего приложенного напряжения τ . Энергетическая выгодность расщепления определялась по положению начальной точки зависимости $\Delta W(q)$ при $q = 2$ nm: чем меньше значение ΔW в этой точке, тем более выгодна данная конфигурация. Данные для Al и α -Al₂O₃ представлены на рис. 7,а и 7,б

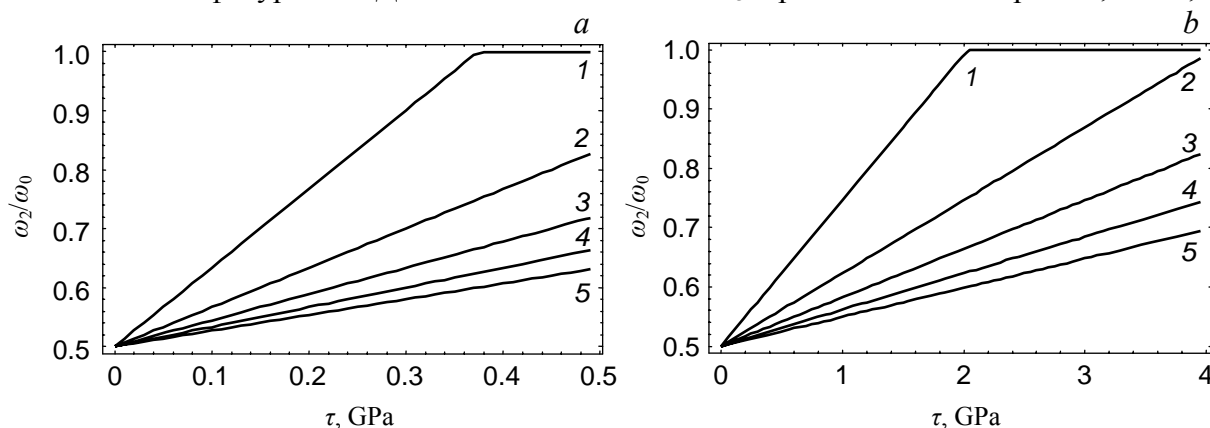


Рис. 7. Зависимость параметра ω_2/ω_0 , при котором обеспечивается максимальный энергетический выигрыш процесса зарождения нового нанозерна, от величины приложенного напряжения τ в: (а) нанокристаллическом Al; (б) нанокристаллическом α -Al₂O₃. Кривые 1, 2, 3, 4 и 5 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ и 0.5 и построены при $p = 5$ nm.

соответственно. Кривые 1, 2, 3, 4 и 5 построены для $p = 5$ nm и соответствуют значениям $\omega_0 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ и 0.5 . Хорошо видно, что с ростом приложенного напряжения более выгодным становится асимметричное расщепление с $\omega_2 > \omega_1$ вплоть до ситуации, когда расщепление превращается в перемещение исходного диполя, т.е. $\omega_1 = 0$, $\omega_2 = \omega_0$ (см. кривую 1 на рис. 7).

6. Наномасштабная аморфизация на дисклинационных квадрупольях в деформируемых наноматериалах

Перейдем теперь к рассмотрению процессов локальной (наномасштабной) аморфизации в нанокристаллических материалах при пластической деформации. В настоящем разделе будет развиты кратко обсуждавшиеся ранее [35] представления, которые связывают наномасштабную аморфизацию в деформируемых нанокристаллических материалах с трансформациями квадрупольных клиновых дисклинаций.

Известно несколько микромеханизмов образования дисклинационных квадрупольных в нанокристаллических материалах [14,27,46-49]. В частности, миграция ГЗ под действием приложенного напряжения может приводить к образованию дисклинационных квадрупольных (рис. 1) [14,46,47]. При этом дисклинации находятся в вершинах прямоугольника (четырёхугольника в общем случае), образованного двумя неподвижными границами AC и BD, мигрирующей ГЗ в ее новом положении CD и отрезком AB, соответствующем исходному положению мигрирующей ГЗ, как показано на рис. 1 и 8,а.

Квадруполь клиновых дисклинаций создает большие упругие напряжения в прямоугольной области (ABCD на рис. 8,с), вершинами которой служат дисклинации [36,37]), и сравнительно малые за пределами такой области. Напряжения в пределах области ABCD близки к напряжениям, создаваемым изолированной дисклинацией в нанопроволоке. Согласно результатам компьютерного моделирования [57], ядро дисклинации в нанопроволоке может расплываться, формируя наномасштабную аморфную область. Движущей силой этого процесса является уменьшение упругой энергии дисклинации [57]. С учетом этого мы предполагаем, что аморфизация может также происходить в прямоугольной области ограниченной дисклинациями, возникающими в процессе пластической деформации (рис. 8,с,д). В процессе трансформации дисклинации расплываются в аморфной области ABCD, напряжения исходного дисклинационного квадруполья (рис. 8,с) релаксируют, уменьшая упругую энергию системы, что и является движущей силой аморфизации. С другой стороны, разность свободных энергий аморфной и кристаллической фазами положительна, что препятствует образованию аморфной области ABCD (рис. 8,с). Также при аморфизации формируются границы раздела типа кристалл/стекло (рис. 8,д), замещающие исходные ГЗ (рис. 8,с). Трансформация ГЗ в границы кристалл/стекло может, как способствовать, так и препятствовать аморфизации в зависимости от значений энергии границ.

7. Энергетические характеристики наномасштабной аморфизации

Проведем расчет изменения полной энергии системы ΔW в процессе аморфизации области ABCD (рис. 8,с,д). В начальном состоянии система представляет собой прямоугольный дисклинационный квадруполь, характеризующийся линейными размерами p и q и мощностью дисклинаций $\pm \omega_0$ (рис. 8,с). Изменение энергии ΔW (в расчете на единицу длины дисклинации) состоит из трех слагаемых:

$$\Delta W = \Delta g_v pq + \Delta W_i - W_{el}^q, \quad (11)$$

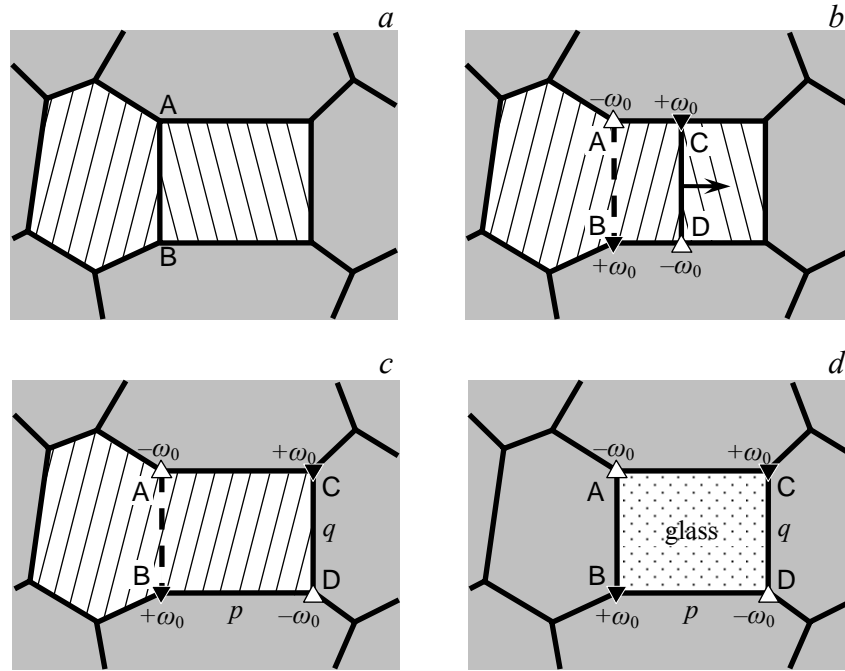


Рис. 8. Формирование дисклинационного квадруполя в наноматериале и последующая аморфизация, индуцированная полями напряжений квадруполя. (a) Исходная нанокристаллическая структура, содержащая ГЗ АВ. (b) Миграция ГЗ из исходного положения АВ в новое положение CD с образованием дисклиний (треугольники) в стыках ГЗ. (c) Мигрирующая ГЗ сливается с неподвижной ГЗ, тем самым формируя квадруполь клиновых дисклиний ABCD с линейными размерами $p \times q$. (d) Аморфизация наномасштабной области ABCD в результате трансформации дисклинационного квадруполя.

где Δg_v – разность свободных энергии (в расчете на единицу объема) аморфной и кристаллической фаз, ΔW_i – изменение суммарной энергии границ раздела, связанное с трансформацией ГЗ в границы кристалл/стекло, W_{el}^q – собственная упругая энергия дисклинационного квадруполя. Энергия квадруполя W_{el}^q рассчитывается по известной формуле [36] и имеет вид:

$$W_{el}^q = \frac{G\omega_0^2}{4\pi(1-\nu)} \left[p^2 \ln \frac{p^2 + q^2}{p^2} + q^2 \ln \frac{p^2 + q^2}{q^2} \right]. \quad (12)$$

Для того чтобы записать изменение энергии ΔW_i необходимо знать исходную (до аморфизации) конфигурацию ГЗ, окружающих область ABCD. В конфигурации, изображенной на рис. 8,с, изначально имеются три ГЗ: AC, CD и AD. Ниже мы рассмотрим два полярных случая. (i) Границы AC, CD и AD являются *обычными* ГЗ, характеризующимися удельной поверхностной энергией γ_{gb} , и после аморфизации трансформируются в границы раздела между аморфной и кристаллической фазой с поверхностной энергией γ_{a-c} . Кроме того в результате аморфизации области ABCD на месте, где изначально не было никаких границ раздела, появляется граница раздела АВ кристалл/стекло (рис. 8,д). (ii) Границы AC, CD и AD являются *специальными* ГЗ с очень низкой энергией, которая в первом приближении может быть положена равной нулю. После аморфизации граница раздела ABCD между кристаллической и аморфной фазой характеризуется удельной поверхностной энергией γ_{a-c} .

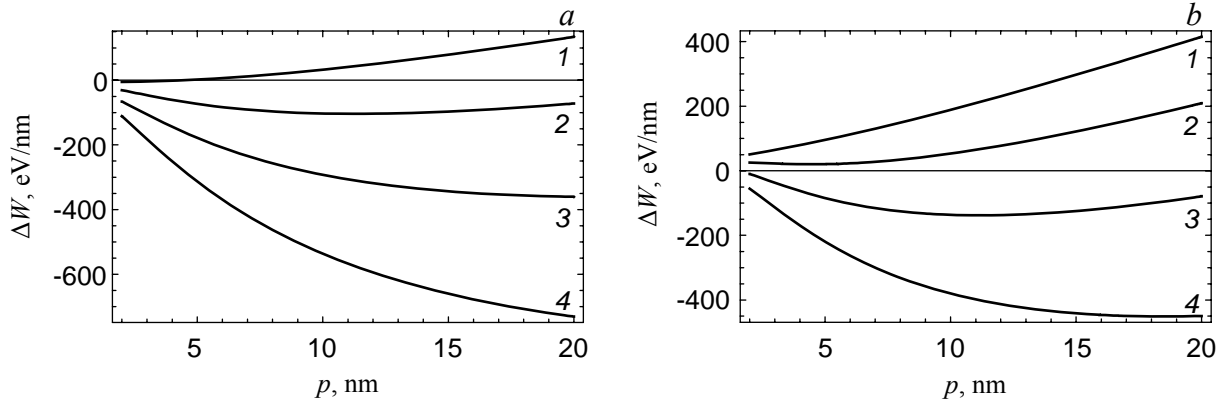


Рис. 9. Зависимости изменения полной энергии системы ΔW от размера квадруполя p при фиксированном значении $q = 5$ нм в Si, рассчитанные для исходной конфигурации: (a) с обычными ГЗ; (b) со специальными ГЗ. Кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям $\omega = 0.2, 0.3, 0.4$ и 0.5 .

В случае (i) изменение энергии ΔW_i представляется в виде:

$$\Delta W_i = (2p + q)(\gamma_{a-c} - \gamma_{gb}) + q\gamma_{a-c}. \quad (13)$$

В случае (ii) мы фактически полагаем $\gamma_{gb} = 0$, т.е. изменение энергии ΔW_i записывается как

$$\Delta W_i = 2(p + q)\gamma_{a-c}. \quad (14)$$

Подставляя формулы (12)–(14) в (11) и используя значения Δg_v , γ_{a-c} и γ_{gb} , доступные из экспериментов или работ по моделированию, можно рассчитать изменение энергии ΔW в результате аморфизации, вызываемой упругими напряжениями дисклинационного квадруполя (рис. 8).

8. Модельные расчеты характеристик наномасштабной аморфизации в деформируемом нанокристаллическом кремнии

Выполним расчет изменения энергии ΔW на примере нанокристаллического Si (кремний). Для Si типичны следующие значения параметров: $G = 68.1$ GPa, $\nu = 0.218$ [52], $\Delta g_v = 0.100$ eV/atom, $\gamma_{a-c} = 0.102$ eV/atom [58,59]. Учитывая, что среднее межатомное расстояние в Si равно 0.27 nm [59], энергии Δg_v и γ_{a-c} можно пересчитать на единицу объема и площади соответственно как: $\Delta g_v = 8.13 \cdot 10^8$ J/m³, $\gamma_{a-c} = 0.231$ J/m² [59]. В качестве зернограничной энергии γ_{gb} используем результаты моделирования для симметричной границы наклона в Si [60], согласно которым, если исключить из рассмотрения малоугловые и двойниковые ГЗ, в среднем, $\gamma_{gb} \approx 1$ J/m². Сопоставляя значения γ_{a-c} и γ_{gb} для Si, можно сделать вывод, что изменение энергии ΔW_i , рассчитанное по формуле (13) всегда отрицательно, а ΔW_i , рассчитанное по формуле (14), напротив, всегда дает положительный результат.

На рис. 9,а и 9,б представлены кривые зависимостей $\Delta W(p)$ в Si, построенные для случая исходной конфигурации с обычными и специальными ГЗ (т.е. с использованием формул (13) и (14)) соответственно. Кривые 1, 2, 3 и 4 на рис. 9 соответствуют значениям $\omega_0 = 0.2, 0.3, 0.4$ и 0.5 и фиксированному значению $q = 5$ nm. Зависимости $\Delta W(p)$ построены в диапазоне $p > 2$ nm, т.к. при меньших значениях p дисклинация

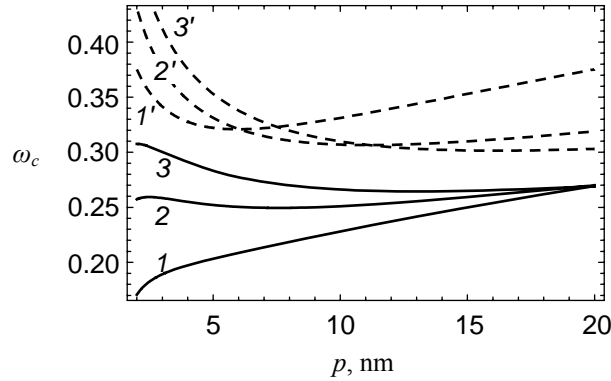


Рис. 10. Зависимости критической мощности ω_c квадруполя дисклинаций в Si от размера p квадруполя. Сплошные и пунктирные кривые соответствуют изменению энергии ΔW_i , рассчитанному по формулам (13) и (14) соответственно. Кривые 1, 2 и 3 (1', 2' и 3') соответствуют значениям $q = 5, 10$ и 15 nm.

квадруполя располагаются слишком близко друг к другу, что приводит к вопросу о применимости методов континуальной теории упругости.

Из кривых на рис. 9 видно, что для любого фиксированного значения p с ростом мощности ω_0 квадруполя изменение энергии ΔW постепенно уменьшается, становясь отрицательной при некотором критическом значении $\omega = \omega_c$. Из равенства $\Delta W = 0$ можно найти критическое значение ω_c мощности дисклинаций квадруполя:

$$\omega_c = \left(\frac{4\pi(1-\nu)(\Delta g_v pq + \Delta W_i)}{G[p^2 \ln(q^2/p^2 + 1) + q^2 \ln(p^2/q^2 + 1)]} \right)^{1/2}. \quad (15)$$

Наномасштабная аморфизация энергетически невыгодна при $\omega < \omega_c$ и выгодна при $\omega > \omega_c$.

На рис. 10 показаны зависимости $\omega_c(p)$ в Si. Сплошные и пунктирные кривые на рис. 10 соответствуют изменению энергии ΔW_i , рассчитанному по формулам (13) и (14) соответственно. Кривые 1, 2 и 3 (1', 2' и 3') соответствуют значениям $q = 5, 10$ и 15 nm. Из зависимостей на рис. 10 хорошо видно, что величина $\omega_c < 0.5$ при типичных значениях p . Такая мощность достижима для дисклинаций, генерируемых в процессе пластической деформации в нанокристаллических материалах (в частности, при индуцированной напряжением миграции ГЗ [14,46,47]).

9. Заключение и выводы

В настоящей работе были предложены теоретические модели процессов зарождения зерен и наномасштабной аморфизации в деформируемых нанокристаллических материалах. Зарождение зерен моделируется как процесс, реализующийся посредством расщепления и миграции ГЗ, в то время как наномасштабная аморфизация рассматривается как процесс трансформации дисклинационных квадруполей, генерируемых в процессе пластической деформации.

В рамках предложенной модели было показано, что зарождение нанозерен при пластической деформации может осуществляться безбарьерным путем в нанокристаллических Al и α -Al₂O₃ в определенном диапазоне их параметров и уровня приложенного напряжения. Наша модель объясняет результаты компьютерного моделирования [24-26] и экспериментов [61,62], в которых было обнаружено зарождение зерен на тройных

стыках ГЗ в деформируемых наноматериалах. В частности, мы рассмотрели два варианта зарождения нанозерен: зарождение, приводящее к появлению зерна, все границы которого являются обычными ГЗ, и зарождение нанозерна с двумя обычными и двумя специальными ГЗ. Последний вариант является более выгодным энергетически, но накладывает определенные ограничения на разориентировки ГЗ и мощности дисклинаций, вовлеченных в процесс зарождения нанозерен.

Также было показано, что наномасштабная аморфизация энергетически выгодна в нанокристаллическом Si, деформируемом при больших приложенных напряжениях в определенном диапазоне структурных параметров Si. Наномасштабная аморфизация эффективно реализуется путем трансформации дисклинационных квадруполей (рис. 8), если мощность дисклинаций превосходит некоторое критическое значение ω_c .

Работа выполнена при поддержке Программы РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов” и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 08-01-00225-а).

Литература

- [1] C.C. Koch // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **5** (2003) 91.
- [2] C.C. Koch // *J. Mater. Sci.* **42** (2007) 1403.
- [3] C.C. Koch, I. A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [4] H.J. Fecht, E. Hellstern, Z. Fu, W.L. Johnson // *Met. Trans. A* **21** (1990) 2333.
- [5] R.B. Schwarz, C.C. Koch // *Appl. Phys. Lett.* **49** (1986) 146.
- [6] K. Omuro, H. Miura // *Appl. Phys. Lett.* **64** (1994) 2961.
- [7] P.R. Okamoto, J.K. Heuer, N.Q. Lam, S. Ohnuki, Y. Matsukawa, K. Tozawa, J.F. Stubbins // *Appl. Phys. Lett.* **73** (1998) 473.
- [8] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Phys. Rev. B* **73** (2006) 172107.
- [9] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **92**, 081914 (2008).
- [10] Y.Q. Wu, X.Y. Yang, Y.B. Xu // *Acta Mater.* **47** (1999) 2431.
- [11] M. Chen, J.W. McCauley, K.J. Hemker // *Science* **299** (2003) 1563.
- [12] Y.M. Wang, E. Ma // *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 2750.
- [13] G.-D. Zhan, J.E. Garay, A.K. Mukherjee // *Nano Lett.* **5** (2005) 2593.
- [14] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 251916.
- [15] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Acta Mater.* **53** (2005) 1.
- [16] Y.M. Wang, E.M. Bringa, J.M. McNaney, M. Victoria, A. Caro, A.M. Hodge, R. Smith, B. Torralva, B.A. Remington, C.A. Schuh, H. Jamarkani, M.A. Meyers // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 061917.
- [17] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 171927.
- [18] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [19] Y. Mo, I. Szlufarska // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 181926.
- [20] J. Li, Z.Q. Jin, J.P. Liu, Z.L. Wang, N.N. Thadhani // *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 2223.
- [21] E. Ma // *Scr. Mater.* **49** (2003) 941.
- [22] A.C. Lund, C.A. Schuh // *Appl. Phys. Lett.* **82** (2003) 2017.
- [23] I. Szlufarska, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta // *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 378.
- [24] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Nature Mater.* **1**, 45 (2002).
- [25] M.J. Demkowicz, A.S. Argon, D. Farkas, M. Frary // *Philos. Mag.* **87** (2007) 4253.
- [26] A.Cao, Y. Wei // *Phys. Rev. B* **76** (2007) 024113.

- [27] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, *Физическая механика деформируемых наноструктур. Том 1. Нанокристаллические материалы* (Янус, Санкт-Петербург, 2003).
- [28] В.А. Поздняков, А.М. Глезер // *ФТТ* **47** (2005) 793.
- [29] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев // *ФТТ* **47** (2005) 816.
- [30] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, Ю.В. Петров, А.Г. Шейнерман // *Докл. АН* **406** (2006) 480.
- [31] С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько // *ФТТ* **49** (2007) 1044.
- [32] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, Yu.V. Petrov, A.G. Sheinerman // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **19** (2009) 63.
- [33] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. A* **81** (2005) 1083.
- [34] T.D. Chen, S. Feng, M. Tang, J.A. Valdez, Y. Wang, K. Sickafus // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 263115.
- [35] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **93** (2008) 061904.
- [36] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro (North Holland, Amsterdam, 1992), Vol. 9, p.191.
- [37] M. Kleman, J. Friedel // *Rev. Mod. Phys.* **80** (2008) 61.
- [38] G. Dimitrakopoulos, Ph. Komminou, Th. Karakostas, R.C. Pond // *Interface Sci.* **7** (1999) 217.
- [39] M. Jin, A.M. Minor, E.A. Stach, J.W. Morris Jr. // *Acta Mater.* **52** (2004) 5381.
- [40] W.A. Soer, J.T.M. De Hosson, A.M. Minor, J.W. Morris Jr., E.A. Stach // *Acta Mater.* **52** (2004) 5783.
- [41] J.T.M. De Hosson, W.A. Soer, A.M. Minor, Z. Shan, E.A. Stach, S.A. Syed Asif, O.L. Warren // *J. Mater. Sci.* **41** (2006) 7704.
- [42] K. Zhang, J.R. Weertman, J.A. Eastman // *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 5197; **87** (2005) 061921.
- [43] P.L. Gai, K. Zhang, J. Weertman // *Scr. Mater.* **56** (2007) 25.
- [44] X.Z. Liao, A.R. Kilmametov, R.Z. Valiev, H. Gao, X. Li, A.K. Mukherjee, J.F. Bingert, Y.T. Zhu // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 021909.
- [45] D. Pan, T.G. Nieh, M.W. Chen // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 161922.
- [46] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман // *Докл. АН* **419** (2008) 184.
- [47] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Mater.* **56** (2008) 2718.
- [48] I.A. Ovid'ko // *Science* **295** (2002) 2386.
- [49] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials* (Springer, Berlin, etc., 2004).
- [50] T. Mura, *Micromechanics in solids* (Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1987).
- [51] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, *Interfaces in Crystalline Materials* (Clarendon, Oxford, 1995).
- [52] Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Атомиздат, Москва, 1972).
- [53] R.G. Munro // *J. Am. Ceram. Soc.* **80** (1997) 1919.
- [54] A. Otsuki, M. Mizuno, *Grain Boundary Structure and Related Phenomena*, Suppl. Trans. JIM, Vol. 27 (Japan Institute of Metals, 1986), p. 789.
- [55] G.C. Hasson, C. Goux // *Scr. Metall.* **5** (1971) 889.
- [56] T. Watanabe, H. Yoshida, T. Saito, T. Yamamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma // *Mater. Sci. Forum* **304–306** (1999) 601.
- [57] K. Zhou, A.A. Nazarov, M.S. Wu // *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 035501.
- [58] C. Spinella, S. Lombardo, F. Priolo // *J. Appl. Phys.* **84** (1998) 5383.
- [59] M. Zacharias, P. Streitenberger // *Phys. Rev. B* **62** (2000) 8391.
- [60] M. Kohyama // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **10** (2002) R31.
- [61] H. Miura, T. Sakai, H. Hamaji, J.J. Jonas // *Scr. Mater.* **50** (2004) 65.
- [62] H. Miura, T. Sakai, S. Andriawanto, J.J. Jonas // *Philos. Mag.* **85** (2005) 2653.