

ВЛИЯНИЕ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НА ТРЕЩИНОСТОЙКОСТЬ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Н.Ф. Морозов,^{1,2} И.А. Овидько,^{1,2*} А.Г. Шейнерман,¹ Е.С. Aifantis³

¹Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург 199178

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург 198504

³Aristotle University of Thessaloniki, 54124 Thessaloniki, Greece

*email: ovidko@def.ipme.ru

Аннотация. Предложена теоретическая модель, которая описывает влияние миграции границ зерен (ГЗ) на рост трещин в деформируемых нанокристаллических материалах. В рамках модели миграция ГЗ происходит под действием высоких сдвиговых напряжений, действующих вблизи вершин трещин, и сопровождается образованием квадруполей клиновых дисклинаций. Показано, что миграция ГЗ затрудняет рост трещин и, таким образом, приводит к увеличению трещиностойкости деформируемых нанокристаллических материалов.

Ключевые слова: нанокристаллические материалы, разрушение, трещины, границы зерен

1. Введение

Нанокристаллические материалы обладают уникальными механическими свойствами и служат перспективными кандидатами для применения во многих отраслях промышленности [1–9]. Вместе с тем нанокристаллические материалы, как правило, являются хрупкими. Хрупкость нанокристаллических материалов со сверхмалыми размерами зерен обусловлена подавлением (обычного для поликристаллов) скольжения решеточных дислокаций в таких материалах [1–9], тенденцией быстрого слияния наноскопических трещин [10] и другими факторами, связанными с наноскопическими размерами зерен и присутствием большого числа ГЗ в нанокристаллических материалах. Вместе с тем в нанокристаллических материалах действуют альтернативные микромеханизмы пластической деформации, которые не дают заметного вклада в пластическую деформацию в поликристаллических материалах с большими размерами зерен. Эти микромеханизмы включают зернограничное проскальзывание [11,12], диффузионную ползучесть по границам зерен (ГЗ) [13] и их тройным стыкам [14], повороты зерен [6,15] и миграцию ГЗ [11,16,17]. Мы будем рассматривать случай, когда одним из доминирующих микромеханизмов пластической деформации является индуцированная напряжением миграция ГЗ. Отметим, что недавние экспериментальные наблюдения роста зерен в деформируемом нанокристаллическом Al [18], а также теоретические расчеты [19] показали, что миграция ГЗ заметно усиливается вблизи вершин трещин.

В работе [20] было показано, что миграция ГЗ в нанокристаллическом материале вызывает образование квадруполя клиновых дисклинаций, мощность (величина вектора Франка) которых равна по модулю углу разориентации мигрирующей ГЗ или его отклонению от $2\pi/m$, где m – ось симметрии кристалла. Такие дисклинации являются мощными источниками напряжений, которые могут влиять на рост трещин. Целью настоящей работы является теоретический анализ влияния миграции ГЗ вблизи вершин трещин (сопровождающейся образованием дисклинационных квадруполей) на трещиностойкость нанокристаллических материалов.

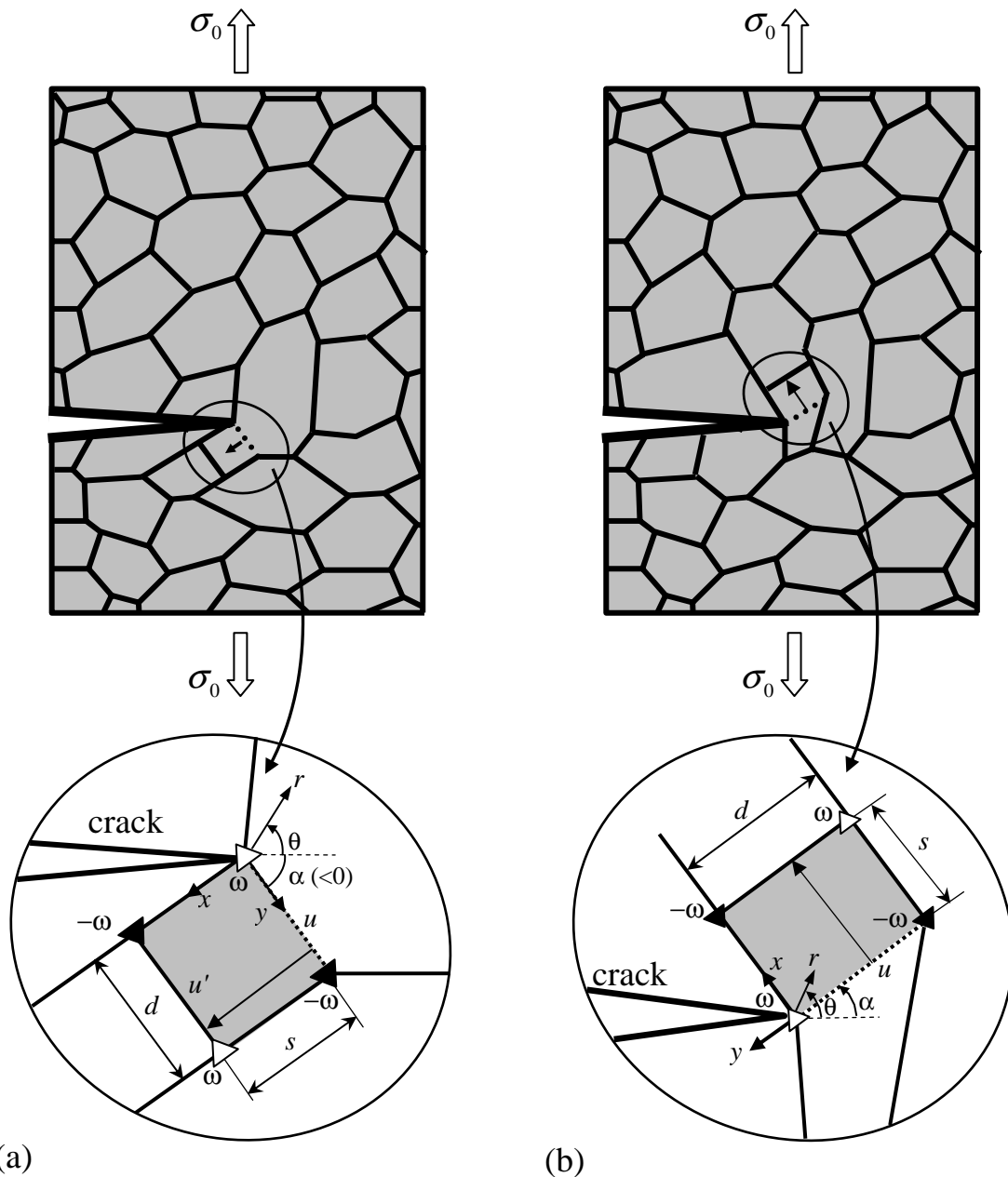


Рис. 1. Миграция границы зерен и образование дисклинационного квадруполя вблизи вершины трещины в деформируемом нанокристаллическом материале. Рисунки (a) и (b) иллюстрируют различные направления миграции границы.

2. Миграция границ зерен вблизи вершин трещин в нанокристаллических материалах. Основные положения модели

Рассмотрим деформируемый нанокристаллический материал, содержащий трещину (Рис. 1). Будем моделировать материал как упругоизотропное твердое тело с модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν . Основываясь на результатах работы [21], будем предполагать, что испускание дислокаций из вершины трещины подавлено. Для простоты рассмотрим случай, когда материал находится под действием одноосной растягивающей нагрузки σ_0 , перпендикулярной плоскости трещины. В этом случае трещина является трещиной нормального отрыва (Рис. 1).

Внешняя нагрузка, приложенная к материалу, и высокая концентрация напряжений вблизи вершины трещины могут вызвать миграцию ГЗ вблизи этой вершины. Миграция ГЗ уменьшает высокие упругие напряжения, действующие вблизи вершины трещины, и тем самым замедляет рост трещины.

Полагая, что интенсивность миграции ГЗ и влияние миграции на рост трещины значительно усиливаются по мере уменьшения расстояния от мигрирующей ГЗ до вершины трещины, будем считать, что влияние миграции ГЗ на рост трещины определяется в основном миграцией ГЗ, примыкающей к вершине трещины. Поэтому для приближенной оценки влияния миграции ГЗ на рост трещины будем рассматривать только миграцию одной из ГЗ, примыкающей к вершине трещины (Рис. 1).

Для анализа влияния миграции ГЗ на рост трещины рассмотрим нанокристаллический материал с модельным расположением зерен, разделенных границами (Рис. 1a,b). Введем прямоугольную систему координат (x, y) как показано на Рис. 1a и 1b. Пусть трещина имеет длину l , а вершина трещины $x = y = 0$ находится в стыке двух ГЗ. Пусть также одна из этих ГЗ, обозначенная u (Рис. 1), образует прямой угол с соседней ГЗ. За счет действия внешней нагрузки σ_0 и концентрации напряжений у вершины трещины ГЗ u мигрирует в новое положение u' (Рис. 1).

Будем предполагать, что мигрирующая ГЗ является границей наклона. Тогда, как указано выше, миграция ГЗ приводит к образованию квадруполя клиновых дисклинаций с мощностями $\pm\omega$, равными по модулю углу разориентации мигрирующей ГЗ (или его отклонению от $2\pi/m$, где m – ось симметрии кристалла). Обозначим длину ГЗ u символом d , а длину ее миграции символом s . Эти длины служат одновременно характерными масштабами (называемыми плечами) дисклинационного квадруполя.

3. Общий расчет эффекта миграции границ зерен вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических материалов

Рассмотрим влияние дисклинационного квадруполя, образованного в результате миграции ГЗ, на вязкость разрушения нанокристаллического материала. Для этого воспользуемся критерием [22] роста трещины, основанным на балансе между движущей силой, связанной с уменьшением упругой энергии системы, и силой, препятствующей росту трещины и связанной с появлением свободных поверхностей при ее росте. В рассматриваемом случае плоского напряженного состояния этот критерий имеет вид [22]:

$$\frac{1-\nu}{2\mu}(K_I^2 + K_{II}^2) = 2\gamma_e, \quad (1)$$

где K_I и K_{II} – коэффициенты интенсивности нормальных (к плоскости трещины) и сдвиговых напряжений соответственно; $\gamma_e = \gamma$ (где γ – удельная поверхностная энергия) для трещины, растущей внутри зерна, и $\gamma_e = \gamma - \gamma_b/2$ (где γ_b – удельная энергия ГЗ) для трещины, распространяющейся по ГЗ. В рассматриваемом случае, когда

направление роста трещины перпендикулярно направлению внешней нагрузки, коэффициенты K_I и K_{II} рассчитываются по формулам

$$K_I = K_I^\sigma + k_I^q, \quad K_{II} = k_{II}^q. \quad (2)$$

В формулах (2) K_I^σ – коэффициент интенсивности напряжений, созданных внешней нагрузкой σ_0 , а k_I^q и k_{II}^q – коэффициенты интенсивности напряжений, созданных дисклинационным квадруполем (Рис. 1).

При макроскопическом механическом описании влияние локального пластического течения (миграции ГЗ, приводящей к образованию дисклинационного квадруполя) на рост трещины можно учесть посредством введения критического значения коэффициента интенсивности напряжений K_{IC} . В этом случае предполагается, что трещина растет под действием внешней нагрузки, перпендикулярной направлению роста трещины, а наличие дисклинационного квадруполя просто изменяет значение K_{IC} по сравнению со случаем роста хрупкой трещины. Как следствие, критическое условие роста трещины при этом имеет вид (например, [23]): $K_I^\sigma = K_{IC}$.

Подставляя (2) в (1) и учитывая равенство $K_I^\sigma = K_{IC}$, получаем следующее выражение для K_{IC} :

$$K_{IC} = \sqrt{(K_{IC}^\sigma)^2 - (k_{IC}^q)^2} - k_{IC}^q. \quad (3)$$

В формуле (3) $K_{IC}^\sigma = \sqrt{4G\gamma_e / (1-\nu)}$ – критическое значение коэффициента интенсивности напряжений при отсутствии дисклинационного квадруполя (то есть в случае хрупкого разрушения), $k_{IC}^q = k_{II}^q |_{K_I^\sigma = K_{IC}}$, а $k_{IC}^q = k_I^q |_{K_I^\sigma = K_{IC}}$. Для анализа влияния дисклинационного квадруполя, образующегося в результате миграции ГЗ (Рис. 1), на рост трещины необходимо сравнить значение K_{IC} со значением K_{IC}^σ .

Рассчитаем величину K_{IC} в случае, когда у вершины трещины образуется дисклинационный квадруполь (Рис. 1). Наряду с прямоугольной системой координат (x, y) введем также полярную систему координат (r, θ) с началом в вершине трещины (Рис. 1). Будем считать, что плечи квадруполя малы по сравнению с длиной трещины l ($s, d \ll l$), что позволяет при расчете коэффициентов k_I^q и k_{II}^q считать трещину полубесконечной. (В предельном случае полубесконечной трещины дисклинация ω , расположенная в вершине трещины, выходит на внешнюю свободную поверхность тела и исчезает, и квадруполь превращается в три дисклинации.) Коэффициенты интенсивности напряжений для дисклинационного квадруполя, показанного на Рис. 1, рассчитываются с помощью выражений [24,25] для коэффициентов интенсивности напряжений краевой дислокации, расположенной вблизи вершины полубесконечной трещины. Переход от дислокации к дисклинационному квадруполю при этом осуществляется посредством представления дисклинационных диполей, составляющих квадруполь, в виде непрерывных распределений краевых дислокаций. В результате мы получаем следующие выражения для коэффициентов интенсивности k_I^q и k_{II}^q :

$$k_I^q = G\omega\sqrt{d} f_1(\alpha, t) / [2\sqrt{2\pi}(1-\nu)], \quad k_{II}^q = G\omega\sqrt{d} f_2(\alpha, t) / [2\sqrt{2\pi}(1-\nu)], \quad \text{где } t = s / d,$$

$$f_1(\alpha, t) = \sum_{k=1}^3 (-1)^k \sqrt{\tilde{r}_k} [3 \cos(\theta_k / 2) + \cos(3\theta_k / 2)],$$

$$f_2(\alpha, t) = \sum_{k=1}^3 (-1)^k \sqrt{\tilde{r}_k} [\sin(\theta_k / 2) + \sin(3\theta_k / 2)], \quad (4)$$

$\tilde{r}_k = r_k / d$, а r_k и θ_k – координаты k -ой дисклинации ($k=1,2,3$) и $-\pi < \theta_k \leq \pi$. Для дисклинационной конфигурации, показанной на Рис. 1а, и угла α , лежащего в интервале $-\pi < \alpha \leq \pi$, имеем: $\tilde{r}_1 = 1$, $\tilde{r}_2 = \sqrt{t^2 + 1}$, $\tilde{r}_3 = t$; $\theta_1 = \alpha$, $\theta_2 = \alpha - \pi / 2 + \arccot t + 2\pi \Xi(-\alpha - \pi / 2 - \arccot t)$, $\theta_3 = \alpha - \pi / 2 + 2\pi \Xi(-\pi / 2 - \alpha)$, $\Xi(x)$ – функция Хэвисайда, равная 1 при $x > 0$ и нулю при $x < 0$.

В нашей модели длина s миграции ГЗ, входящая в формулы (4), произвольна. Однако в равновесии длина s миграции ГЗ может соответствовать минимуму энергии ΔW , связанной с образованием дисклинационного квадруполь (Рис. 1). В рассматриваемом случае изменение энергии ΔW представимо в виде

$$\Delta W = W^q + W^{q-\sigma}, \quad (5)$$

где W^q – собственная энергия дисклинационного квадруполь, а $W^{q-\sigma}$ – энергия его взаимодействия с полем напряжений, созданным в теле с трещиной внешней нагрузкой σ_0 .

В первом приближении мы пренебрежем влиянием трещины на энергию W^q и для расчета этой энергии воспользуемся выражением [26] для энергии дисклинационного квадруполь в бесконечном изотропном теле: $W^q = D\omega^2 d^2 h(t) / 2$, где $D = G / [2\pi(1-\nu)]$, $t = s / d$, как и выше, а

$$h(t) = (1+t^2) \ln(1+t^2) - t^2 \ln(t^2). \quad (6)$$

Энергия $W^{q-\sigma}$ представима в виде [27]

$$W^{q-\sigma} = -\omega \int_S \sigma_{xy} dS', \quad (7)$$

где S – поверхность, ограниченная дисклинационным квадрупольем, S' – параметр интегрирования, а σ_{xy} – компонента поля напряжений, созданного в теле с трещиной приложенной нагрузкой σ_0 , в системе координат (x, y) (Рис. 1).

Напряжение σ_{xy} рассчитывается с помощью выражений [23] для напряжений, создаваемых у вершины трещины приложенной внешней нагрузкой. Окончательное выражение для σ_{xy} имеет вид

$$\sigma_{xy} = -\frac{K_I^\sigma}{2\sqrt{2\pi r}} \sin \theta \cos \left(\frac{3\theta}{2} - 2\alpha \right). \quad (8)$$

Подстановка (8) в (7) дает: $W^{q-\sigma} = -K_I^\sigma \omega d^{3/2} f(\alpha, t) / (3\sqrt{2\pi})$, где

$$f(\alpha, t) = \begin{cases} g_1(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=\arccot t}^{\pi/2} + t^{3/2} g_2(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=0}^{\arccot t}, & -\pi/2 < \alpha \leq \pi, \\ g_1(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=\arccot t}^{\alpha+\pi/2} - g_1(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=\alpha+\pi/2}^{\pi/2} + t^{3/2} g_2(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=0}^{\arccot t}, & -\pi < \alpha \leq -\pi/2 - \arccot t, \\ -g_1(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=\arccot t}^{\pi/2} \\ \quad + t^{3/2} \left(g_2(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=0}^{\alpha+\pi/2} - g_2(\theta, \alpha) \Big|_{\theta=\alpha+\pi/2}^{\arccot t} \right), & -\pi/2 - \arccot t < \alpha \leq -\pi/2, \end{cases} \quad (9)$$

$$g_1(\theta, \alpha) = \frac{4 \sin^2[(\theta + \alpha + \pi/2) / 2] \cos[(\theta - \alpha - \pi/2) / 2]}{\sqrt{\sin \theta}}, \quad (10)$$

$$g_2(\theta, \alpha) = \frac{4 \sin^2[(\theta + \alpha + \pi/2) / 2] \sin[(\theta - \alpha - \pi/2) / 2]}{\sqrt{\cos \theta}}. \quad (11)$$

Зависимости $\Delta W(s/d)$, определяемые формулами (5), (6) и (9)–(11), приведены на Рис. 2 для различных значений α и ω и следующих значений параметров, характерных для случая миграции ГЗ у вершины зернограничной трещины в

нанокристаллическом Ni, изображенном на Рис. 1а: $G=73$ GPa, $\nu=0.31$, $\gamma=1.725$ J/m², $\gamma_b=0.69$ J/m² [28,29], $d=15$ nm, $\omega=15^\circ$ и $K_I = K_{IC}^\sigma = \sqrt{2G(2\gamma - \gamma_b)/(1-\nu)}$. Как следует из Рис. 2а, для достаточно больших значений ω ($\omega=15^\circ$) в зависимости от значения угла α возможны две ситуации. В первом случае зависимости $\Delta W(s/d)$ имеют единственный минимум, определяющий положение равновесия ГЗ (см. кривые, соответствующие $\alpha=-60^\circ$ и $\alpha=-120^\circ$ на Рис. 2а). Во втором случае ΔW возрастает с ростом s/d , и миграция ГЗ в направлении, показанном на Рис. 1а, не происходит. Этому случаю соответствуют кривые на Рис. 2а, построенные при $\alpha=30^\circ$ и $\alpha=120^\circ$. Следует также отметить, что при $\alpha=-120^\circ$ миграция ГЗ, хотя и происходит, но является незначительной. Равновесная длина миграции ГЗ, соответствующая минимуму на кривой $\Delta W(s/d)$, равна при этом 0.6 nm. Между тем в случае $\alpha=30^\circ$ равновесная длина миграции ГЗ равна 1.1 nm, то есть этот случай является более благоприятным для миграции ГЗ.

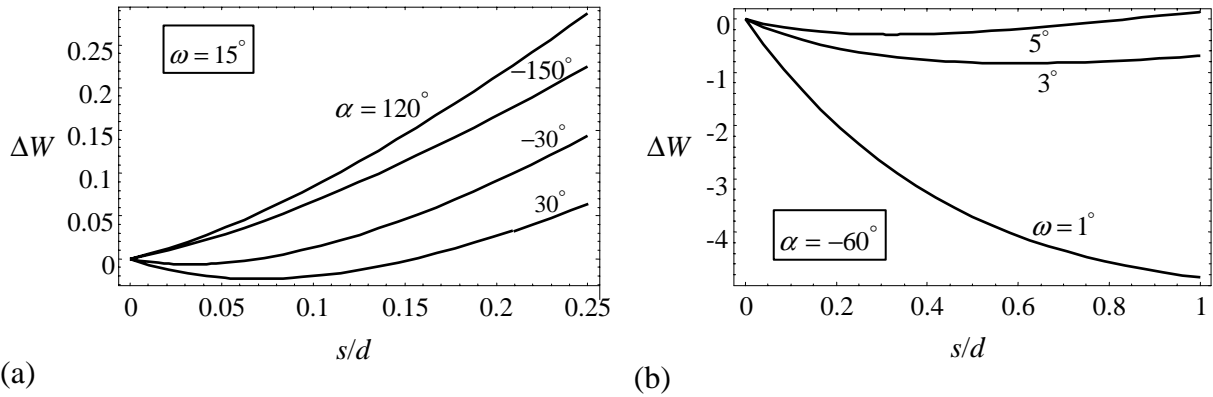


Рис. 2. Зависимости энергии ΔW , связанной с миграцией границы зерен у вершины трещины в нанокристаллическом Ni, от безразмерной длины миграции s/d для различных значений углов α (а) и ω (б). Энергия ΔW приведена в единицах $G\omega^2 d^2 / [4\pi(1-\nu)]$.

Если значение ω достаточно мало, возможна также ситуация, когда ΔW монотонно убывает с ростом s/d (см. нижнюю кривую на Рис. 2b), то есть в рамках модели миграция ГЗ может происходить неограниченно. Разумеется, в реальности длина миграции ГЗ даже в этом случае будет ограничена в связи с наличием соседних ГЗ. Отметим, что в рассматриваемом случае нанокристаллического Ni максимальное значение углов разориентации ГЗ ω , при которых может реализовываться неограниченный режим миграции ГЗ, не превышает 4° для любых значений угла α .

Миграция ГЗ возможна, если выполняется условие $\partial\Delta W / \partial s|_{s \rightarrow 0} \leq 0$. Подставляя в последнее соотношение формулы (5), (7) и (8), получаем, что при $\omega > 0$ миграция ГЗ в направлении, показанном на Рис. 1а, происходит, если $-\pi < \alpha \leq 0$. В случае $0 \leq \alpha \leq \pi$ миграция ГЗ также имеет место, но в противоположном направлении (Рис. 1b). При $\omega < 0$ направления миграции ГЗ меняются на противоположные. Отметим, что из формулы (8) следует, что $\sigma_{xy}(\alpha, \theta) = -\sigma_{xy}(-\alpha, -\theta)$. Это означает, что сдвиговое напряжение, инициирующее миграцию ГЗ, образующую угол α с плоскостью трещины, противоположно по величине сдвиговому напряжению, инициирующую миграцию ГЗ, характеризующуюся углом $-\alpha$. Как следствие, при одинаковых значениях ω равновесная длина миграции ГЗ (если она существует) для ГЗ,

характеризующейся углом α (>0) (Рис. 1b) равна равновесной длине миграции ГЗ, характеризующейся углом $-\alpha$ (Рис. 1a). Поэтому при расчете K_{IC} достаточно рассматривать случай, изображенный на Рис. 1a.

Отметим также, что из последнего соотношения и формулы (8) следует, что при $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$ рассматриваемая ГЗ находится в положении неустойчивого равновесия. Как следствие, в этом случае ГЗ у вершины трещины может мигрировать как в направлении, показанном на Рис. 1a, так и в противоположном направлении, показанном на Рис. 1b.

Равновесная длина s_0 миграции ГЗ, если она существует, получается из соотношения $\partial \Delta W / \partial s|_{s=s_0} = 0$, формулы (5) и выражений для W^q и $W^{q-\sigma}$. Уравнение для определения s_0 имеет вид

$$G\omega\sqrt{d} = \frac{\sqrt{2\pi}(1-\nu)K_I^\sigma \partial f(\alpha, t) / \partial t}{3t \ln(1+1/t^2)} \Bigg|_{t=t_0}, \quad (12)$$

где $t_0 = s_0 / d$.

Рассчитаем теперь коэффициенты интенсивности напряжений k_I^q и k_{II}^q для случая, когда существует равновесная длина миграции ГЗ (характеризуемой равенством $t = t_0$). Подставляя последнее равенство и формулу (12) в выражения для k_I^q и k_{II}^q , получаем: $k_I^q = A K_I^\sigma$, $k_{II}^q = B K_I^\sigma$, где

$$A = \frac{f_1(\alpha, t) \partial f(\alpha, t) / \partial t}{6t \ln(1+1/t^2)} \Bigg|_{t=t_0}, \quad B = \frac{f_2(\alpha, t) \partial f(\alpha, t) / \partial t}{6t \ln(1+1/t^2)} \Bigg|_{t=t_0}. \quad (13)$$

Подстановка последних выражений для k_I^q и k_{II}^q в формулу (3) и решение получившегося уравнения относительно K_{IC} дает:

$$K_{IC} = \frac{K_{IC}^\sigma}{\sqrt{(1+A)^2 + B^2}}. \quad (14)$$

Как следует из формулы (12), миграция ГЗ увеличивает значение K_{IC} (то есть обеспечивает выполнение условия $K_{IC} > K_{IC}^\sigma$), если $-2 < A < 0$ и $|B| < \sqrt{-A(A+2)}$. Кроме того, из формулы (13) следует, что величины A и B зависят только от параметров α и t_0 . Как следствие, безразмерное критическое значение коэффициента интенсивности напряжений K_{IC} / K_{IC}^σ (рассчитываемое по формуле (14)) также зависит только от α и t_0 . В свою очередь, параметр t_0 можно связать мощностью дисклинаций ω и параметрами материала. Для этого рассмотрим критическую трещину (характеризуемую равенством $K_I^\sigma = K_{IC}$) и подставим это равенство, формулу (14) и соотношение $K_{IC}^\sigma = \sqrt{4G\gamma_e / (1-\nu)}$ в формулу (12). Тогда получим:

$$\omega \sqrt{\frac{Gd}{4\gamma_e(1-\nu)}} = \frac{\sqrt{2\pi} \partial f(\alpha, t) / \partial t}{3\sqrt{(1+A)^2 + B^2} t \ln(1+1/t^2)} \Bigg|_{t=t_0}. \quad (15)$$

Для не слишком малых значений ω , при которых существует равновесная длина миграции ГЗ, формулы (14) и (15) позволяют рассчитать K_{IC} как функцию α и ω . Зависимости K_{IC} / K_{IC}^σ от угла α приведены на Рис. 3 для случая зернограничной трещины в нанокристаллическом Ni при $d = 15$ nm и различных значениях мощности

дисклинаций ω . Как следует из Рис. 3, при любых значениях α и ω миграция ГЗ увеличивает значение K_{IC} .

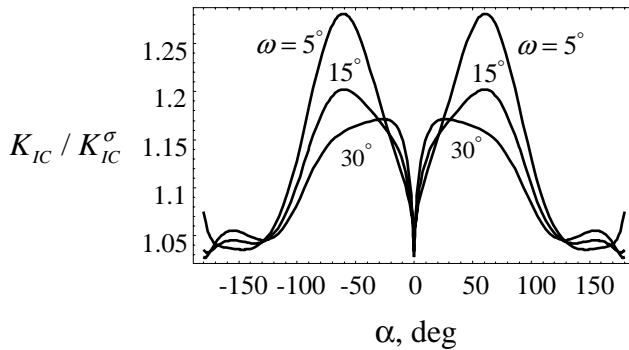


Рис. 3. Зависимости безразмерного критического значения коэффициента интенсивности напряжений K_{IC} / K_{IC}^{σ} от угла α для случая нанокристаллического Ni и различных значений мощности дисклинаций ω .

Предположим теперь, что разрушение в рассматриваемом нанокристаллическом материале происходит путем множественного зарождения и распространения трещин. Пусть также на распространение трещин оказывает влияние миграция различных ГЗ возле вершин трещин. Учитывая короткодействующий характер поля напряжений дисклинационных квадрупольей, образующихся при миграции ГЗ, будем предполагать, что на распространение трещины влияет только миграция ГЗ, примыкающих к ее вершине. Для простоты также пренебрежем распределением ГЗ по углам разориентации и положим разориентации всех ГЗ одинаковыми и равными ω .

В этом случае в первом приближении вязкость разрушения нанокристаллического материала можно определить как среднее значение K_{IC} по различным значениям угла α . Для удобства расчетов предположим, что вблизи вершины каждой трещины мигрирует лишь одна ГЗ (миграция двух или более ГЗ, по-видимому, будет увеличивать вязкость разрушения). Будем полагать, что угол α является случайной величиной, описываемой функцией распределения $\rho_{\alpha}(\alpha) = 1/(2\pi)$, $-\pi < \alpha \leq \pi$. Учитывая, что $K_{IC}(\alpha, \omega) = K_{IC}(-\alpha, \omega)$ (см. Рис. 3), вязкость разрушения $\overline{K_{IC}}$ можно рассчитать по формуле

$$\overline{K_{IC}}(\omega) = (1/\pi) \int_0^{\pi} K_{IC}(\alpha, \omega) d\alpha. \quad (16)$$

4. Оценка эффекта миграции границ зерен на трещиностойкость нанокристаллического никеля и нанокерамики SiC

С помощью формулы (16) оценим влияние миграции ГЗ на вязкость разрушения для случаев нанокристаллического Ni и нанокристаллической керамики 3C-SiC (кубическая фаза карбида кремния). Для Ni будем использовать значения параметров G , ν , γ и γ_b , приведенные выше. Тогда для случая зернограничной трещины в Ni и $d=15$ nm получаем: $\overline{K_{IC}} / K_{IC}^{\sigma} \approx 1.137$, 1.115 и 1.104 для $\omega=5^{\circ}$, 15° и 30° соответственно. Для случая зернограничной трещины в Ni и $d=30$ nm имеем: $\overline{K_{IC}} / K_{IC}^{\sigma} \approx 1.134$, 1.108 и 1.102 для $\omega=5^{\circ}$, 15° и 30° соответственно. Для случая внутризеренной трещины в Ni и $d=15$ nm получаем: $\overline{K_{IC}} / K_{IC}^{\sigma} \approx 1.137$, 1.116 и 1.105 для $\omega=5^{\circ}$, 15° и 30° соответственно. Для

случая внутризеренной трещины в Ni и $d=30$ nm имеем: $\overline{K_{IC}} / K_{IC}^{\sigma} \approx 1.134, 1.109$ и 1.103 для $\omega = 5^{\circ}, 15^{\circ}$ и 30° соответственно.

Для 3C-SiC будем использовать следующие значения параметров: $G=217$ GPa, $\nu = 0.23$, $\gamma = 1.84$ J/m² [30], $d=15$ nm. Тогда для случая внутризеренной трещины в 3C-SiC и $d=15$ nm получаем: $\overline{K_{IC}} / K_{IC}^{\sigma} \approx 1.133, 1.108$ и 1.102 для $\omega = 5^{\circ}, 15^{\circ}$ и 30° соответственно. Для внутризеренной трещины в 3C-SiC и $d=30$ nm имеем: $\overline{K_{IC}} / K_{IC}^{\sigma} \approx 1.124, 1.104$ и 1.102 для $\omega = 5^{\circ}, 15^{\circ}$ и 30° соответственно.

Как следует из приведенных данных, размер зерна и тип трещины (зернограничная или внутризеренная) оказывают незначительное влияние на $\overline{K_{IC}}$. При этом $\overline{K_{IC}}$ незначительно растет при уменьшении угла разориентации ГЗ ω и/или размера зерна d . В общем как в нанокристаллическом Ni, так и в нанокристаллической керамике 3C-SiC миграция ГЗ может увеличивать вязкость разрушения на 10–15%.

5. Заключение

Таким образом, миграция границ зерен в хрупких деформируемых нанокристаллических материалах уменьшает высокие напряжения, действующие в таких материалах вблизи вершин трещин. Тем самым миграция границ зерен увеличивает вязкость разрушения хрупких нанокристаллических материалов. Как следствие, миграция границ зерен может служить механизмом повышения трещиностойкости таких материалов. Отметим, что образующиеся при миграции ГЗ дисклинации (Рис. 1) являются мощными источниками напряжений, которые способны инициировать зарождение наноскопических трещин вблизи вершин мезоскопических трещин в нанокристаллических материалах [31]. Процесс зарождения таких наноскопических трещин обуславливает дополнительный эффект миграции ГЗ на трещиностойкость нанокристаллических материалов. Теоретический анализ данного дополнительного эффекта – предмет дальнейших исследований авторов.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов”, Aristotle University of Thessaloniki (Subcontract of the Contract HPRN-CT-2002-00198), Федерального агентства по науке и инновациям (грант Президента РФ МК-1702.2008.1) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 08-01-00225-а).

Литература

- [1] K.S. Kumar, S. Suresh, H. Swygenhoven // *Acta Mater.* **51** (2003) 5743.
- [2] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько // *Успехи механики* **2** (2003) 68.
- [3] I.A. Ovid'ko // *Int. Mater. Rev.* **50** (2005) 65.
- [4] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson // *Progr. Mater. Sci.* **51** (2006) 427.
- [5] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [6] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [7] E.C. Aifantis // *Mater. Sci. Eng. A* **503** (2009) 190.
- [8] D.A. Konstantinidis, E.C. Aifantis // *Nanostr. Mater.* **10** (1998) 1111.
- [9] W.W. Milligan, S.A. Hackney, M. Ke, E.C. Aifantis // *Nanostr. Mater.* **2** (1993) 267.
- [10] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, Yu.V. Petrov, A.G. Sheinerman // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **19** (2009) 63.
- [11] A.K. Mukherjee // *Mater. Sci. Eng. A* **322** (2002) 1.

- [12] G.-D. Zhan, J.D. Kuntz, J. Wan, A.K. Mukherjee, In: *Nanomaterials for Structural Applications*, MRS Symp Proc., ed. by C.C. Berndt, T. Fischer, I.A. Ovid'ko, G. Skandan, T. Tsakalakos (MRS, Warrendale 2003). Vol. 740, p. 41.
- [13] R.A. Masumura, P.M. Hazzledine, C.S. Pande // *Acta Mater.* **46** (1998) 4527.
- [14] A.A. Fedorov, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Scr. Mater.* **47** (2002) 51.
- [15] M. Murayama, J.M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki // *Science* **295** (2002) 2433.
- [16] W.A. Soer, J.T.M. de Hosson, A. Minor, J.W. Morris, E. Stach // *Acta Mater.* **52** (2004) 5783.
- [17] F. Sansoz, V. Dupont // *Appl. Phys. Lett.* **89** (2006) 111901.
- [18] D.S. Gianola, D.H. Warner, J.F. Molinari, K.J. Hemker // *Scripta Mater.* **55** (2006) 649.
- [19] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман // *ДАН* **419** (2008) 184.
- [20] М.Ю. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 251916.
- [21] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Scripta Mater.* **60** (2009) 627.
- [22] R.G. Irwin // *J. Appl. Mech.* **24** (1957) 361.
- [23] *Механика разрушения и прочность материалов* (под ред. В.В. Панасюка). (Наукова думка, Киев, 1988). Т. 2.
- [24] I.-H. Lin, R. Thomson // *Acta Metall.* **34** (1986) 187.
- [25] Y.-T. Zhang, J.C.M. Li // *Acta Metall. Mater.* **39** (1991) 2739.
- [26] М.Ю. Gutkin, К.Н. Mikaelyan, А.Е. Romanov, Р. Klimanek // *Phys. Status Solidi (a)* **193** (2002) 35.
- [27] В.И. Владимиров, А.Е. Романов, *Дисклинации в кристаллах* (Наука, Л., 1986).
- [28] C.J. Smithells, E.A. Brands, *Metals Reference Book* (Butterworth, London, 1976).
- [29] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [30] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2004) 184117.
- [31] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Acta Mater.* **56** (2008) 2718.