

МИКРОМЕХАНИЗМЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В НАНОДВОЙНИКОВАННЫХ МАТЕРИАЛАХ

Н.В. Скиба^{1,2,3*}, И.А. Овидько^{1,2,3}, А.Г. Шейнерман^{1,2,3}, Я.В. Конаков^{1,2,3}

¹Институт проблем машиноведения Российской академии наук,

Большой пр. 61, В.О., Санкт-Петербург, 199178, Россия

²Математико-механический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет,

Университетский пр. 28, Старый Петергоф, Санкт-Петербург, 198504, Россия

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Политехническая 29, Санкт-Петербург, 195215, Россия

*e-mail: nikolay.skiba@gmail.com

Аннотация. Представлен краткий обзор теоретических моделей, которые описывают специфические механизмы пластической деформации в ультрамелкозернистых материалах с нанодвойниковой структурой (нанодвойникованных материалах). В частности, рассмотрены микромеханизмы расширения нанодвойников и микромеханизмы совместного действия решеточного скольжения и миграции двойниковых границ в нанодвойникованных материалах. Получены теоретические зависимости напряжения течения от пластической деформации в нанодвойникованной меди (Cu). Также, произведено теоретическое описание зависимости предела текучести от толщины нанодвойниковых прослоек в нанодвойникованной меди (Cu). Произведено сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными на примере нанодвойникованной меди (Cu).

1. Введение

Наноструктурные материалы в большинстве случаев характеризуются высокой прочностью и твердостью, но проявляют низкую пластичность, существенно сужая круг их практического использования [1-6]. Однако в последнее время активно развивается класс нанодвойникованных материалов, которые представляют собой ультрамелкозернистые материалы, содержащие внутри зерен ансамбли нанодвойниковых прослоек высокой плотности. Повышенный интерес к нанодвойникованным материалам связан с их высокими механическими характеристиками - уникальным сочетанием сверхвысокой прочности и функциональной пластичности [7-15]. Например, в экспериментальных работах [7-9] было показано, что ультрамелкозернистая медь с заранее сформированной нанодвойниковой структурой имеет предел текучести, превосходящий предел текучести нанокристаллической меди, одновременно сохраняя высокие пластические свойства. Несмотря на значительный прогресс в изучении особенностей деформации нанодвойникованных материалов микромеханика их пластического поведения является предметом активных дискуссий [7-21]. При этом, практически во всех исследованиях [16-21] уникальное сочетание высоких прочностных и пластических характеристик нанодвойникованных материалов связывается с трансформацией нанодвойниковой

прямоугольной формы, которые ограничены двойниковыми границами (Рис. 1а). Нанодвойники моделируются одинаковыми прямоугольниками со сторонами h_0 и d . Поле напряжений, создаваемое каждым нанодвойником, может быть эффективно описано полем напряжения дисклинационного квадруполь с мощностью дисклинаций $\pm\Omega$ ($\pm\Omega$ -дисклинациями) и плечами h_0 и d (Рис. 1б). Согласно теории дефектов в твердых телах [22-24], мощность Ω связана с модулем вектора Бюргерса b дислокации Шокли отношением $\Omega = 2 \arctan(b/2\delta)$. К образцу приложено внешнее растягивающее напряжение σ , которое вызывает действие сдвигового напряжения τ вдоль границ нанодвойников. Двойники ориентированы таким образом, что вдоль их границ действует максимальное сдвиговое напряжение $\tau = \sigma/2$. Действие сдвигового напряжения τ активирует скольжение частичных дислокаций (дислокаций Шокли) вдоль двойниковых границ. Дислокации Шокли двигаются в материалах с ГЦК решеткой вдоль плоскостей скольжения $\{111\}$, формируя позади себя дефект упаковки с удельной энергией γ . Таким образом, элементарный акт скольжения дислокации Шокли вдоль границы двойника приводит к увеличению толщины двойника h_0 на величину δ , равное расстоянию между соседними плоскостями скольжения $\{111\}$ (Рис. 1с). Предполагается, что скольжение частичных дислокаций происходит одновременно вдоль границ всех двойников, имеющих в теле зерна, приводя к одновременному увеличению их толщины h_0 на величину δ и образованию новых двойников толщиной $h_1 = h_0 + \delta$, а расстояния между ними уменьшается на такую же величину δ и становится равным $l_1 = l - \delta$ (Рис. 1с). Расстояние δ между соседними плоскостями скольжения $\{111\}$ связано с параметром решетки a следующим отношением: $\delta = a/\sqrt{3}$. В рамках модели дислокации Шокли представляют собой чисто краевые дислокации типа $(a/6)\langle 11\bar{2} \rangle$, с модулем вектора Бюргерса b равным $b = a/\sqrt{6}$.

Элементарный акт увеличения толщины нанодвойников на величину δ может повторяться многократно. В результате последовательного осуществления n элементарных актов роста толщины нанодвойников в теле зерна образуется N новых двойник толщиной $h = h_0 + n\delta$ (Рис. 1d). При этом расстояния между нанодвойниками уменьшается и становится равным $l_n = l - n\delta$ (Рис. 1d). Каждый акт увеличения толщины нанодвойников требует увеличения величины внешнего сдвигового напряжения τ до некоторой критической величины τ_n^{crit} , определяемой как минимальное сдвиговое напряжение, при котором процесс роста нанодвойников энергетически выгоден. Далее рассмотрим энергетические характеристики последовательного роста толщины h нанодвойников.

Рассмотрим энергетические характеристики перехода дефектной системы из $(n-1)$ -ого состояния, которое характеризуется энергией W_{n-1} системы из N нанодвойников толщиной $h_{n-1} = h_0 + (n-1)\delta$ (возникшей в результате последовательной реализации $(n-1)$ -ого элементарного акта увеличения толщины исходных нанодвойников), в n -ое состояние, характеризуемое энергией W_n системы из N нанодвойников толщиной $h_n = h_0 + n\delta$ (Рис. 1d) (возникшей в результате последовательной реализации n элементарных актов увеличения толщины исходных нанодвойников). Разность полных энергий $\Delta W_n = W_n - W_{n-1}$, характеризующая переход дефектной системы их $(n-1)$ -ого состояния в n -ое состояние может быть записана следующим образом:

Рост толщины нанодвойников сопровождается пластической деформацией ε_n , вклад которой, после реализации n -ого элементарного акта, в общую пластическую деформацию может быть оценен с помощью следующей формулы:

$$\varepsilon_n \approx \frac{nN\delta}{d}. \quad (5)$$

Используя оценку (5) для степени пластической деформации ε_n и выражение $\sigma_n = 2\tau_n^{crit}$ построим кривую зависимости предела текучести от степени пластической деформации на примере мелкозернистой Cu с использованием следующих параметров: $G = 44 \text{ GPa}$, $\nu = 0.38$, $a = 352 \text{ нм}$ [24], $\gamma = 45 \text{ мДж м}^{-2}$ [25]. В качестве среднего размера зерна выберем значение $d = 500 \text{ нм}$. Зависимость $\sigma_n(\varepsilon_n)$ представлена на Рис. 2 при различных значениях исходных толщин h_0 нанодвойников для случая $l = 50 \text{ нм}$ (Рис. 2а) и $l = 25 \text{ нм}$ (Рис. 2б). Количество N нанодвойников в зерне определялось из выражения $N \approx d/(h_0 + l)$, округляя полученное число по правилам округления до целого значения. Из зависимостей на Рис. 2 видно, что увеличение толщины h_0 исходных нанодвойников и уменьшение начальных расстояний l между двойниками приводит к росту предела текучести. Следует отметить, что максимальные значения предела текучести, полученные в экспериментальных работах [7,8] в 1.5÷2 раза ниже, полученных из наших теоретических расчетов. Таким образом, данная теоретическая модель [16] дает качественное описание микромеханизма пластической деформации за счет миграции двойниковых границ в нанодвойникованных материалах. В следующем разделе будет рассмотрена более общая теоретическая модель микромеханизма расширения нанодвойников путем миграции двойниковых границ, сопровождающегося решеточным скольжением.

3. Микромеханизм совместного действия решеточного скольжения и миграции двойниковых границ

Рассмотрим модельную систему – зерно, содержащее N нанодвойников толщиной λ и расстоянием l между соседними двойниками (Рис. 3). Действие внешнего напряжения σ активирует скольжение частичных дислокаций (дислокаций Шокли) вдоль двойниковых границ, что приводит к их миграции.

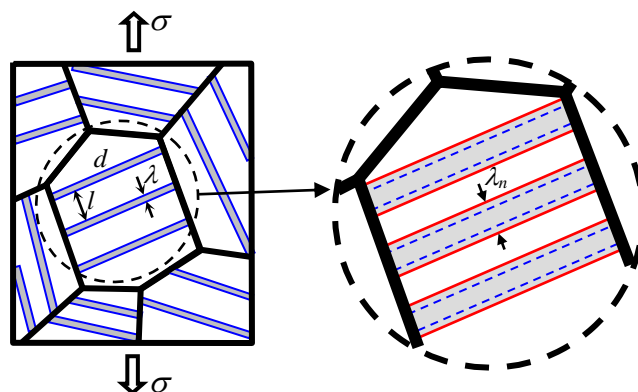


Рис. 3. Модель пластической деформации нанодвойникованного материала за счет роста толщины нанодвойников.

Согласно данным теоретических моделей [17,18] происходит одновременная миграция всех двойниковых границ, приводя к увеличению толщины двойников λ на величину 2δ , где $\delta = a/\sqrt{3}$. Элементарный акт увеличения толщины нанодвойников на

где $b = a/\sqrt{2}$ - величина пластического сдвига, возникающего в результате действия решеточного скольжения.

Используя оценку (9) для степени пластической деформации ε_n и выражение (8) для σ_n построим кривую зависимости $\sigma_n(\varepsilon_n)$ на примере нанодвойникованной меди, с использованием ее следующих параметров: $G = 44$ ГПа, $\nu = 0.38$, $a = 0.352$ нм [24], $\sigma_0 = 200$ МПа, $K_{HP} = 1750$ МПа [25]. Параметры логнормального распределения (6) $s = 1/3$ и λ_{avg} брались из экспериментальных данных [7,8]. Количество N нанодвойников в зерне определялось из выражения $N \approx d/(\lambda_{avg} + l)$ с округлением до целого значения.

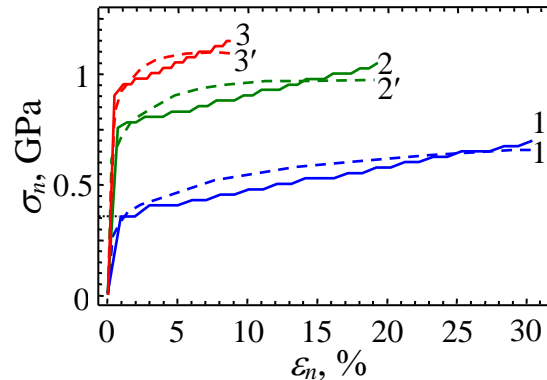


Рис. 4. Зависимость напряжения σ_n от степени пластической деформации ε_n при различных значениях средней толщины нанодвойников $\lambda_{avg} = 4$ нм (кривая 1, 1'), 10 нм (кривая 2, 2'), 15 нм (кривая 3, 3') (1, 2, 3 – теоретические кривые; 1', 2', 3' – экспериментальные кривые).

Зависимость $\sigma_n(\varepsilon_n)$ представлена на Рис. 4 при различных значениях средних толщин λ_{avg} нанодвойников для случая, когда среднее расстояние между нанодвойниками $l = 40$ нм. На Рис. 4 представлено сравнение теоретических зависимостей $\sigma_n(\varepsilon_n)$ (сплошные кривые 1, 2 и 3) с экспериментальными данными (кривые 1', 2' и 3') из работ [7,8]. Полученные нами теоретические зависимости демонстрируют хорошее количественное совпадение с экспериментальными данными. Также, из зависимостей на Рис. 4 видно, что увеличение толщины λ_{avg} нанодвойников приводит к росту напряжения течения.

4. Определение предела текучести в нанодвойникованных материалах

Используя результаты теоретической модели [18], рассмотрим отдельное зерно, содержащее N двойниковых границ, расстояния между которыми одинаково и равно λ (Рис. 5). Действие внешней растягивающей нагрузки σ приводит к возникновению сдвигового напряжения τ вдоль двойниковых границ. В рамках модели, скольжение частичных b -дислокаций приводит к перемещению двойниковых границ в направлении, перпендикулярном плоскости границы, на расстояние между соседними плоскостями параллельными плоскости двойниковой границы. Предполагается, что одновременно происходит миграция всех двойниковых границ, имеющих в теле зерна. Процесс зарождения и скольжения частичной b -дислокации моделируется возникновением дислокационного диполя с векторами Бюргерса $\pm b$ (Рис. 5). Таким образом, процесс одновременной миграции N двойниковых границ может быть описан образованием N диполей частичных $\pm b$ -дислокаций (Рис. 5). В результате,

$$C = Db^2 \sum_{k=1}^{N/2-1} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (N/2 - k) \left(\ln \left[1 + \frac{d^2}{[\lambda(2k-1) - \delta(j+i)]^2} \right] - \frac{2d^2}{d^2 + [\lambda(2k-1) - \delta(j+i)]^2} \right),$$

$$E = Db^2 \sum_{k=1}^{N/2-1} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (N/2 - k) \left(\ln \left[1 + \frac{d^2}{[2\lambda k + \delta(i-j)]^2} \right] - \frac{2d^2}{d^2 + [2\lambda k + \delta(i-j)]^2} \right),$$

$$F = Db^2 \sum_{k=1}^{N/2-1} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (N/2 - k) \left(\ln \left[1 + \frac{d^2}{[2\lambda k + \delta(j-i)]^2} \right] - \frac{2d^2}{d^2 + [2\lambda k + \delta(j-i)]^2} \right).$$

Энергия E_{n-1}^{b-b} упругого взаимодействия между всеми диполями $\pm b$ -дислокаций для $n-1$ -ого состояния получается из формулы (12) простой заменой n на $n-1$.

Энергия E_N^τ упругого взаимодействия с внешним сдвиговым напряжением E_N^τ дается стандартной формулой:

$$E_N^\tau = -N\tau b d. \quad (13)$$

С помощью формул (10)-(13) получим выражения для полной разности энергий ΔW_n . Реализация n -ого элементарного акта пластической деформации становится возможной при достижении внешним сдвиговым напряжением τ некоторой величины τ_n^{crit} , которая может быть определена из условия $\Delta W_n = 0$ дается следующим выражением:

$$\tau_n^{crit} = \frac{NDb^2 \left(\ln \frac{d-b}{b} + 1 \right) + A + B + C + E + F}{Nbd}. \quad (14)$$

Используем значение критического сдвигового напряжения τ_n^{crit} для оценки предела текучести σ_y^{th} . Предположим, что предел текучести σ_y^{th} соответствует величине критического напряжения $\tau_{\gamma=0.02}^{crit}$, которое требуется для достижения пластической деформации $\gamma_n = 2\%$. Критическое нормальное напряжение σ_n^{crit} связано с критическим сдвиговым напряжением τ_n^{crit} следующим выражением: $\sigma_n^{crit} = 2\tau_n^{crit} / \sin 2\theta$, где θ - средний угол, учитывающие различие в ориентации плоскостей скольжения частичных дислокаций по отношению к направлению действия внешнего сдвигового напряжения.

Пластическая деформация за счет миграции двойниковых границ происходит только в зернах, в которых ориентация двойниковых границ близка к направлению действия максимального сдвигового напряжения. Как отмечалось во введении, результаты экспериментальных исследований указывают на изменение зависимости предела текучести σ_y от расстояния λ между двойниковыми границами на противоположную при достижении расстоянием λ некоторого значения λ_* , которое определяется из экспериментальных данных. В модели предполагается, что это вызвано включением другого механизма пластической деформации, а именно решеточного скольжения, которое реализуется за счет скольжения решеточных дислокаций с векторами Бюргера B в промежутках между двойниковыми границами. Напряжение σ_{HP} , при котором начинает действовать решеточное скольжение может быть оценено с помощью соотношения Холла-Петча: $\sigma_{HP} = \sigma_0 + K_{HP} d_m^{-1/2}$, где σ_0 и K_{HP} - индивидуальные для каждого материала константы, d_m - средний размер структуры, на котором осуществляется скольжение. В нашей модели предполагается, что

расстояниях между двойниковыми границами ($\lambda < \lambda_* = 15 \text{ nm}$) величина предела текучести нанодвойникового материала возрастает с увеличением расстояния между этими границами (Рис. 6). В случае больших расстояний между двойниковыми границами ($\lambda \geq \lambda_* = 15 \text{ nm}$) наблюдается обратная тенденция, а именно снижение величины предела текучести с ростом расстояния между двойниковыми границами (Рис. 2). Из Рис. 6 видно, что теоретическая зависимость $\sigma_y^{\text{th}}(\lambda)$ предела текучести от расстояния между двойниковыми границами демонстрирует хорошее совпадение с экспериментальными данными $\sigma_y^{\text{exp}}(\lambda)$.

Заключение

Таким образом, представлены теоретические модели, которые описывают особенности пластической деформации ультрамелкозернистых материалов с нанодвойниковой структурой. В моделях пластическая деформация осуществляется за счет последовательной миграции двойниковых границ и решеточного скольжения в промежутках между двойниковыми границами. Описание микромеханизмов пластичности основывалось на теоретическом подходе, заключающемся в расчете энергетических характеристик процессов трансформации дефектной структуры, вызывающей пластическую деформацию нанодвойникованных материалов. Используя предложенный теоретический подход, получены зависимости напряжения течения от пластической деформации мелкозернистой меди с нанодвойникованной структурой при одноосном растяжении, которые показали хорошее качественное и количественное совпадение с экспериментальными данными. Также, определены значения предела текучести нанодвойниковой меди в предположение одновременного действия деформации двойникованием и решеточного скольжения, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными. Хорошее совпадение с экспериментальными данными наших теоретических расчетов позволяет утверждать, что нами выявлены основные микромеханизмы пластической деформации (расширение нанодвойников и решеточное скольжение), которые ответственны за уникальное деформационное поведение нанодвойниковой меди. Результаты данного теоретического исследования могут быть использованы на практике при формировании в мелкозернистых материалах нанодвойниковых прослоек, давая рекомендации по оптимизации их структуры, позволяющие достичь одновременного сочетания высокой прочности и функциональной пластичности этих материалов.

Данная работа выполнена при поддержке (для Н.В.С.) Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 16-32-60110) и Министерства Образования и Науки Российской Федерации (грант Президента РФ МД-9152.2016.1), и (для А.Г.Ш. и Я.В.К.) Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 15-31-20095).

Литература

- [1] С.С. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge, Cambridge University Press, 2007).
- [2] E.C. Aifantis // *Materials Science & Engineering A* **503** (2009) 190.
- [3] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progress in Materials Science* **54** (2009) 689.
- [4] R.Z. Valiev, T.G. Langdon // *Progress in Materials Science* **51** (2006) 881.
- [5] M. Kawasaki, T.G. Langdon // *Journal of Materials Science* **42** (2007) 1782.
- [6] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Reviews of Advanced Materials Science* **37** (2014) 97.
- [7] L. Lu, X. Chen, X. Huang, K. Lu // *Science* **323** (2009) 607.
- [8] K. Lu, L. Lu, S. Suresh // *Science* **324** (2009) 349.

plastic strain in nanotwinned copper (Cu) is calculated. Also, dependence of the yield stress on twin thickness in nanotwinned copper (Cu) is theoretically described. Our theoretical results and their comparison with corresponding experimental data in the exemplary case of nanotwinned copper (Cu) are discussed.

Acknowledgements

This work was supported (for NVS) by the Russian Fund of Basic Research (grant 16-32-60110) and the Ministry of Education and Science of Russian Federation (grant MD-9152.2016.1), and (for AGS and YaVK) by the Russian Fund of Basic Research (grant 15-31-20095).

References

- [1] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge, Cambridge University Press, 2007).
- [2] E.C. Aifantis // *Materials Science & Engineering A* **503** (2009) 190.
- [3] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progress in Materials Science* **54** (2009) 689.
- [4] R.Z. Valiev, T.G. Langdon // *Progress in Materials Science* **51** (2006) 881.
- [5] M. Kawasaki, T.G. Langdon // *Journal of Materials Science* **42** (2007) 1782.
- [6] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Reviews of Advanced Materials Science* **37** (2014) 97.
- [7] L. Lu, X. Chen, X. Huang, K. Lu // *Science* **323** (2009) 607.
- [8] K. Lu, L. Lu, S. Suresh // *Science* **324** (2009) 349.
- [9] Y.M. Wang, F. Sansoz, T. LaGrange, R.T. Ott, J. Marian, T.W. Barbee Jr., A.V. Hamza // *Nature Materials* **12** (2013) 697.
- [10] L. Lu, Y. Shen, X. Chen, L. Qian, K. Lu // *Science* **304** (2004) 422.
- [11] T. Zhu, H. Gao // *Scripta Materialia* **66** (2012) 843.
- [12] Z. You, X. Li, L. Gui, Q. Lu, T. Zhu, H. Gao, L. Lu // *Acta Materialia* **61** (2013) 217.
- [13] Q. Huang, D. Yu, B. Xu, W. Hu, Y. Ma, Y. Wang, Z. Zhao, B. Wen, J. He, Z. Liu, Y. Tian // *Nature* **510** (2014) 250.
- [14] P. Gu, M. Dao, Y. Zhu // *Philosophical Magazine* **94** (2014) 1249.
- [15] H. Zhou, X. Li, S. Qu, W. Yang, H. Gao // *Nano Letters* **14** (2014) 5075.
- [16] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Reviews of Advanced Materials Science* **37** (2014) 29.
- [17] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Doklady Physics* **60** (2015) 507.
- [18] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, N.V. Skiba // *Reviews of Advanced Materials Science* **41** (2015) 93.
- [19] X. Li, Y. Wei, L. Lu, K. Lu, H. Gao // *Nature* **464** (2010) 877
- [20] Z. You, X. Li, L. Gui, Q. Lu, T. Zhu, H. Gao and L. Lu // *Acta Materialia* **61** (2013) 217.
- [21] Y. Tian, B. Xu, D. Yu, Y. Ma, Y. Wang, Y. Jiang, W. Hu, C. Tang, Y. Gao, K. Luo, Z. Zhao, L.-M. Wang, B. Wen, J. He, Z. Liu // *Nature* **493** (2013) 385.
- [22] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, vol. 9, ed. by F.R.N. Nabarro (North-Holland, Amsterdam, 1992), p. 191.
- [23] A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova // *Progress in Materials Science* **54** (2009) 740.
- [24] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [25] R.A. Masumura, P.M. Hazzledine, C.S. Pande // *Acta Materialia* **46** (1998) 4527.