

# ВЛИЯНИЕ МИГРАЦИИ ДВОЙНИКОВЫХ ГРАНИЦ НА ТРЕЩИНОСТОЙКОСТЬ НАНОДВОЙНИКОВАННЫХ МЕТАЛЛОВ

И.А. Овидько,<sup>1,2,3\*</sup> А.Г. Шейнерман<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург, 195251

<sup>2</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178

<sup>3</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 198504

\*e-mail: ovidko@nano.ipme.ru

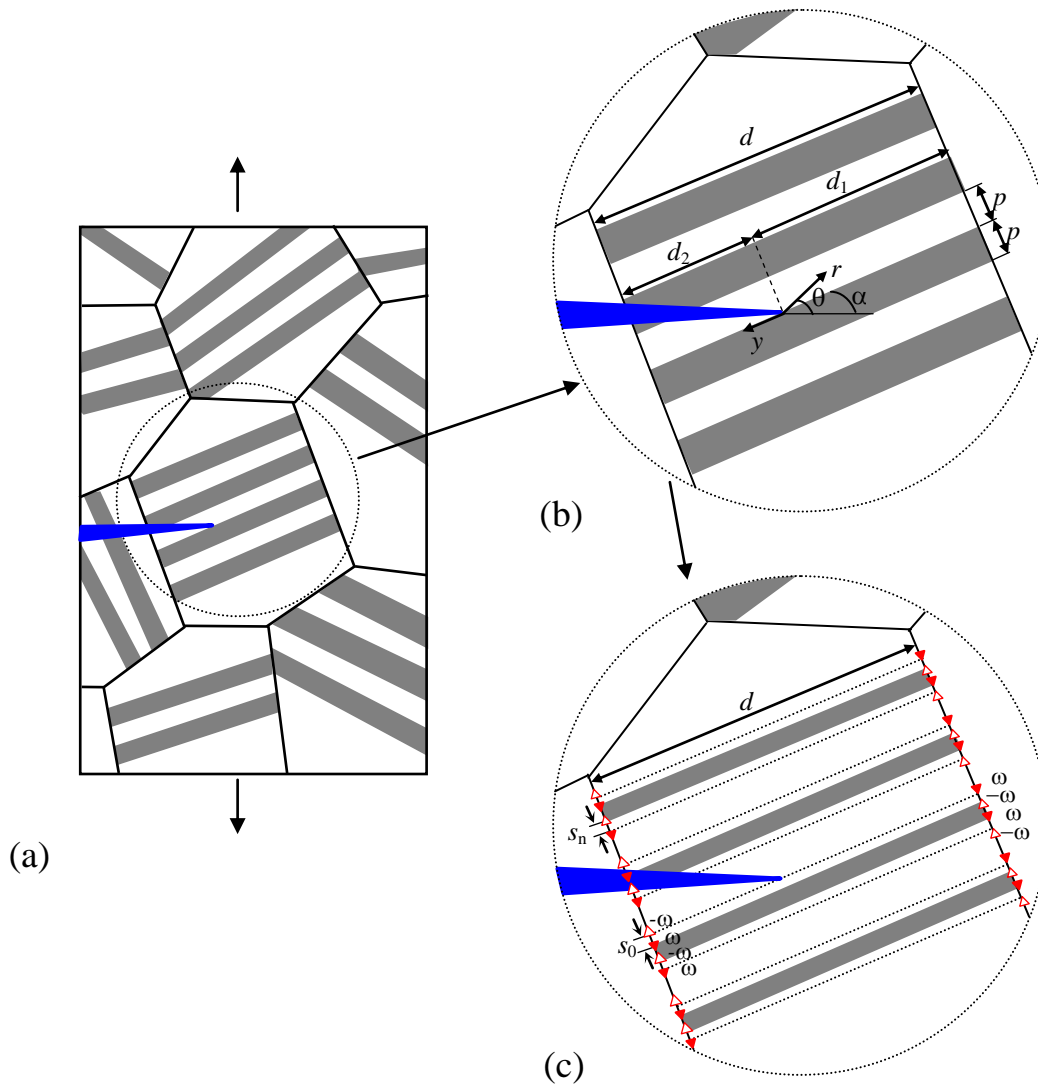
**Аннотация.** Предложена теоретическая модель, которая описывает влияние миграции границ двойников на рост трещин в деформируемых нанодвойникованных металлических материалах. В рамках модели миграция границ двойников происходит под действием высоких напряжений, действующих вблизи вершин трещин, и сопровождается образованием квадрупольных клиновых дисклинаций. Показано, что миграция двойниковых границ затрудняет рост трещин и таким образом приводит к увеличению трещиностойкости деформируемых нанодвойникованных металлов.

## 1. Введение

Нанодвойникованные материалы (обычно металлы) – ультрамелкозернистые поликристаллические материалы, зерна которых содержат большое число двойников наноскопической толщины [1–16]. Нанодвойникованные металлы обладают превосходными механическими свойствами, включающими очень высокую прочность в сочетании с хорошей пластичностью [1–16]. Эксперименты и результаты компьютерного моделирования свидетельствуют о том, что в нанодвойникованных металлах с малыми толщинами двойников пластическая деформация во многом определяется процессами, происходящими на двойниковых границах. В частности, в нанодвойникованных металлах с гранцентрированной кубической (ГЦК) решеткой при достаточно малых толщинах двойников происходит переход от скольжения дислокаций внутри двойников к скольжению частичных дислокаций Шокли вдоль двойниковых границ, приводящему к миграции таких границ [17–22], а в ряде случаев и к росту двойников (например, [18]). Наряду с влиянием на процессы пластической деформации, двойниковые границы в нанодвойникованных металлах играют большую роль в происходящих в таких металлах процессах разрушения. Вместе с тем эксперименты дают противоречивые результаты о влиянии двойниковых границ и толщины двойников на рост трещин в нанодвойникованных материалах. Так, в работе [23] наблюдался вязко-хрупкий переход при увеличении плотности двойников в золотых нанодвойникованных нанопроволоках, а в работах [2, 24, 25] при исследовании нанодвойникованной меди был зафиксирован противоположный эффект. Прямые наблюдения [26] роста трещин в деформируемых нанодвойникованных серебряных пленках в просвечивающий электронный микроскоп высокого разрешения продемонстрировали, что рост трещин в нанодвойникованных металлах одновременно



частичных дислокации Шокли) сопровождается образованием ступенек на поверхностях трещины. Однако в первом приближении мы будем пренебрегать образованием таких ступенек и считать трещину плоской.



**Рис. 1.** Миграция двойниковых границ в деформируемом нанодвойникованном металлическом образце, содержащем трещину. (а) Деформируемый нанодвойникованный металлический образец, содержащий трещину (общий вид). Увеличенные фрагменты рисунка (b), (c) показывают миграцию двойниковых границ и образование ансамбля дисклинационных квадруполов в типичном модельном зерне вблизи вершины трещины. (b) Модельное зерно содержит  $2N + 1$  двойниковую границу. (c) Миграция границ двойников в модельном зерне, сопровождающаяся образованием ансамбля дисклинационных квадруполов.

Следует отметить, что в исходном состоянии (до начала пластической деформации нанодвойникованного образца) стыки между границами зерен и границами двойников могут как быть бездефектными, так и содержать дефекты. В работе [30] рассматривался случай, когда углы разориентации границ зерен нанодвойникованного материала были постоянны по всей длине границы, а стыки границ зерен и границ двойников в недеформированном нанодвойникованном образце содержали клиновые дисклинации, мощность которых была по модулю равна углу разориентации двойниковых границ. Иными словами, в модели [30] рассматривался модельный



критического значения коэффициента интенсивности напряжений  $K_{IC}$ . В этом случае предполагается, что трещина растёт под действием внешней нагрузки, перпендикулярной направлению роста трещины, а наличие дисклинационного квадруполь просто изменяет значение  $K_{IC}$  по сравнению со случаем роста хрупкой трещины. Как следствие, критическое условие роста трещины при этом имеет вид (например, [32]):  $K_I^\sigma = K_{IC}$ .

Подставляя (2) в (1) и учитывая равенство  $K_I^\sigma = K_{IC}$ , получаем следующее выражение для  $K_{IC}$  [33, 34]:

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

В формуле (3)  $K_{IC}^\sigma = \sqrt{4G\gamma / (1-\nu)}$  – критическое значение коэффициента интенсивности напряжений при отсутствии дисклинационного квадруполь (то есть в случае хрупкого разрушения),  $k_{II}^q = k_{II}^q |_{K_I^\sigma = K_{IC}}$ , а  $k_{IC}^q = k_I^q |_{K_I^\sigma = K_{IC}}$ . Для случая, когда пластическая деформация у вершины трещины слабо изменяет значение  $K_{IC}$  (то есть  $|K_{IC} - K_{IC}^\sigma| / K_{IC}^\sigma \ll 1$ ), выражения для  $k_{IC}$  и  $k_{II}$  можно также переписать в виде  $k_{II}^q = k_{II}^q |_{K_I^\sigma = K_{IC}^\sigma}$ ,  $k_{IC}^q = k_I^q |_{K_I^\sigma = K_{IC}^\sigma}$ . Для анализа влияния дисклинационного квадруполь, образующегося в результате миграции границы двойников (рис. 1), на рост трещины необходимо сравнить значение  $K_{IC}$  со значением  $K_{IC}^\sigma$ .

Рассчитаем величину  $K_{IC}$  в случае, когда у вершины трещины образуется ансамбль дисклинационных квадруполь (рис. 1с). Для этого введём прямоугольную систему координат  $(x, y)$  и полярную систему координат  $(r, \theta)$  с началом в вершине трещины (рис. 1б). Будем считать, что плечи квадруполь малы по сравнению с длиной трещины  $l$  ( $s, d \ll l$ ), что позволяет при расчёте коэффициентов  $k_I^q$  и  $k_{II}^q$  считать трещину полубесконечной. Выражения для коэффициентов интенсивности напряжений, создаваемых ансамблем дисклинационных квадруполь, образующихся в результате миграции двойниковых границ (рис. 1с), рассчитываются по следующим формулам [33, 34]:  $k_I^q = G\omega\sqrt{d} f_1 / [2\sqrt{2\pi}(1-\nu)]$ ,  $k_{II}^q = G\omega\sqrt{d} f_2 / [2\sqrt{2\pi}(1-\nu)]$ , где

$$f_1 = \sum_{n=-N}^N \sum_{k=1}^4 (-1)^{k+n} \sqrt{\tilde{r}_{kn}} [3\cos(\theta_{kn}/2) + \cos(3\theta_{kn}/2)],$$

$$f_2 = \sum_{n=-N}^N \sum_{k=1}^4 (-1)^{k+n} \sqrt{\tilde{r}_{kn}} [\sin(\theta_{kn}/2) + \sin(3\theta_{kn}/2)], \quad (4)$$

$\tilde{r}_{kn} = r_k / d$ , а  $r_{kn}$  и  $\theta_{kn}$  – координаты  $k$ -ой дисклинации ( $k = 1, 2, 3, 4$ )  $n$ -ого дисклинационного квадруполь и  $-\pi < \theta_{kn} \leq \pi$ . Для дисклинационной конфигурации, показанной на рис. 1с, имеем:  $r_{1n} = (n^2 p^2 + d_2^2)^{1/2}$ ,  $r_{2n} = (n^2 p^2 + d_1^2)^{1/2}$ ,  $r_{3n} = ((np + s_n (-1)^n)^2 + d_1^2)^{1/2}$ ,  $r_{4n} = ((np + s_n (-1)^n)^2 + d_2^2)^{1/2}$ ;  $\theta_{1n} = \alpha - \pi + \arctan(np / d_2)$ ,  $\theta_{2n} = \alpha - \arctan(np / d_1)$ ,  $\theta_{3n} = \alpha - \arctan((np + s_n (-1)^n) / d_1)$ ,  $\theta_{4n} = \alpha - \pi + \arctan((np + s_n (-1)^n) / d_2)$ .

В нашей модели длины  $s_n$  миграции границ двойников, входящие в формулы (4), произвольны. Однако в равновесии длины  $s_n$  миграции двойниковых границ могут соответствовать минимуму энергии  $\Delta W$ , связанной с образованием дисклинационного

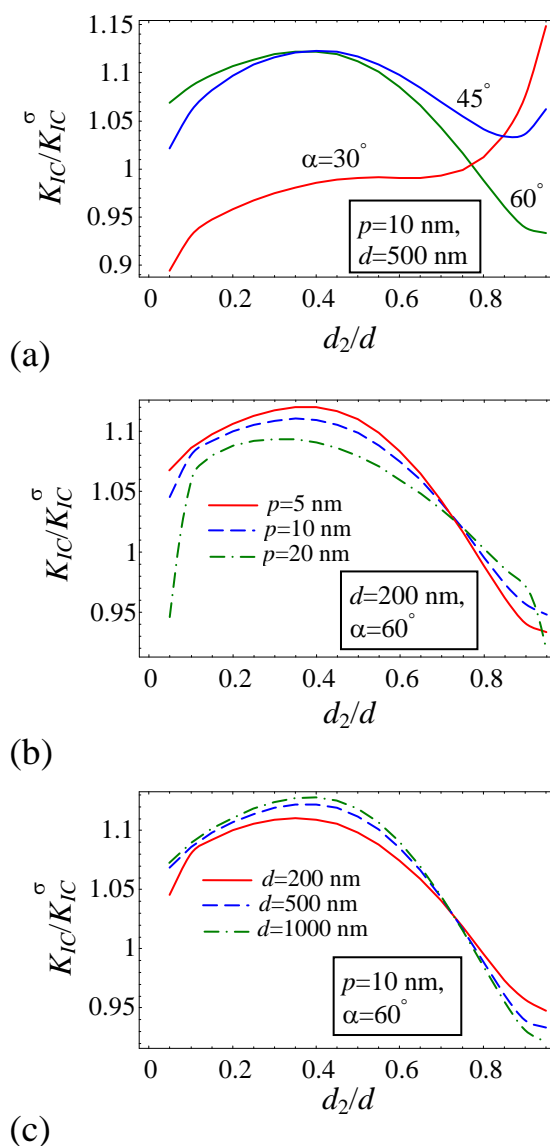


$$\sqrt{2\pi d}(1-\nu)K_I^\sigma \sum_{n=-N}^N \frac{\partial}{\partial s} (g(d_1, s) - g(d_2, s)) \Big|_{s=np+s_n(-1)^n} = 3G\omega q_n, \quad (11)$$

где

$$q_n = \sum_{j=-N}^N t \ln(1 + 1/t^2) \Big|_{t=[(n-j)p+s_n(-1)^n]/d}^{t=[(n-j)p+s_n(-1)^n-s_j(-1)^j]/d}. \quad (12)$$

Теперь равновесные значения длин  $s_n$  миграции двойниковых границ можно найти путем численного решения системы уравнений (11). Подстановка полученных значений  $s_n$  в формулы (3) и (4) позволяет рассчитать критическое значение  $K_{IC}$  коэффициента интенсивности напряжений у вершины трещины.



**Рис. 2.** Зависимости безразмерного критического коэффициента интенсивности напряжений  $K_{IC} / K_{IC}^\sigma$  от параметра  $d_2 / d$ , для различных значений параметров  $p$ ,  $d$  и  $\alpha$ .

Зависимости параметра  $K_{IC} / K_{IC}^\sigma$ , характеризующего отношение  $K_{IC}$  критического





- [7] T. Zhu, H. Gao // *Scripta Materialia* **66** (2012) 843.
- [8] Z. You, X. Li, L. Gui, Q. Lu, T. Zhu, H. Gao, L. Lu // *Acta Materialia* **61** (2013) 217.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] P. Gu, M. Dao, Y. Zhu // *Philosophical Magazine* **94** (2014) 1249.
- [12] T.A. Furnish, A.M. Hodge // *APL Materials* **2** (2014) 046112.
- [13] I.J. Beyerlein, X. Zhang, A. Misra // *Annual Review of Materials Research* **44** (2014) 329.
- [14] V. Borovikov, M.I. Mendeleev, A.H. King // *Philosophical Magazine* **94** (2014) 2875
- [15] H. Zhou, X. Li, S. Qu, W. Yang, H. Gao // *Nano Letters* **14** (2014) 5075.
- [16] J. Bian, X. Niu, H. Zhang, G. Wang // *Nanoscale Research Letters* **9** (2014) 335.
- [17] J.W. Yan, G.P. Zhang // *Applied Physics Letters* **102** (2013) 211905.
- [18] R. Niu, K. Han // *Scripta Materialia* **68** (2013) 960.
- [19] J. Wang, N. Li, O. Anderoglu, X. Zhang, A. Misra, J.Y. Huang, J.P. Hirth // *Acta Materialia* **58** (2010) 2262.
- [20] H. Mirkhani, S.P. Joshi // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **68** (2014) 107.
- [21] Z.J. Jie, X. FangDa, Y. YongDa, S. Tao // *Chinese Science Bulletin* **58(6)** (2013) 684.
- [22] Y. Wei // *Materials Science and Engineering: A* **528** (2011) 1558.
- [23] J. Wang, F. Sansoz, J. Huang, Y. Liu, S. Sun, Z. Zhang, S.X. Mao // *Nature Communications* **4** (2013) 1742.
- [24] S. Zhong, T. Koch, M. Wang, T. Scherer, S. Walheim, H. Hahn, T. Schimmel // *Small* **5** (2009) 2265.
- [25] D. Jang, X. Li, H. Gao, J.R. Greer // *Nature Nanotechnology* **7** (2012) 594.
- [26] L. Liu, J. Wang, S.K. Gong, S.X. Mao // *Scientific Reports* **4** (2014) 4397.
- [27] H.F. Zhou, S.X. Qu // *Nanotechnology* **21** (2010) 35706.
- [28] H.F. Zhou, S.X. Qu, W. Yang // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **18** (2010) 65002.
- [29] L.L. Zhu, H.H. Ruan, X.Y. Li, M. Dao, H.J. Gao, J. Lu // *Acta Materialia* **59** (2011) 5544.
- [30] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Reviews on Advanced Materials Science* **37** (2014) 29.
- [31] R.G. Irwin // *J. Appl. Mech.* **24** (1957) 361.
- [32] *Механика разрушения и прочность материалов*, Т. 2, под ред. В.В. Панасюка (Наукова думка, Киев, 1988).
- [33] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман, Е.С. Аифантис // *Materials Physics and Mechanics* **8** (2009) 155.
- [34] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **58** (2010) 1088.
- [35] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, A.E. Romanov, P. Klimanek // *Physica Status Solidi A* **193** (2002) 35.
- [36] В.И. Владимиров, А.Е. Романов, *Дисклинации в кристаллах* (Наука, Л., 1986).

# EFFECT OF TWIN BOUNDARY MIGRATION ON FRACTURE TOUGHNESS OF NANO-TWINNED METALS

I.A. Ovid'ko,<sup>1,2,3\*</sup> A.G. Sheinerman<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Saint Petersburg State Polytechnical University, St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>2</sup>Institute for Problems of Mechanical Engineering, St. Petersburg, 199178, Russia

<sup>3</sup>Saint Petersburg State University, St. Petersburg, 198504, Russia

\*e-mail: ovidko@nano.ipme.ru

**Abstract.** A model is proposed that describes the effect of twin boundary migration in fracture toughness of nanotwinned solids. Within the model, twin boundary migration occurs under the action of high stress fields acting near the crack tip and is accompanied by the formation of the quadrupoles of wedge disclinations. It is shown that twin boundary migration hinders crack growth and thereby increases fracture toughness of nanotwinned solids.

## *Acknowledgements*

*This work was supported, in part (for IAO), by the Ministry of Education and Science of Russian Federation (Zadanie № 9.1964.2014/K) and, in part (for AGS), by the St. Petersburg State University (research grant 6.37.671.2013).*

## **References**

- [1] L. Lu, Y. Shen, X. Chen, L. Qian, K. Lu // *Science* **304** (2004) 422.
- [2] L. Lu, X. Chen, X. Huang, K. Lu // *Science* **323** (2009) 607.
- [3] K. Lu, L. Lu, S. Suresh // *Science* **324** (2009) 349.
- [4] X. Li, Y. Wei, L. Lu, K. Lu, H. Gao // *Nature* **464** (2010) 877.
- [5] A. Stukowski, K. Albe, D. Farkas // *Physical Review B* **82** (2010) 224103.
- [6] A.M. Hodge, T.A. Furnish, A.A. Navid, T.W. Barbee, Jr. // *Scripta Materialia* **65** (2011) 1006.
- [7] T. Zhu, H. Gao // *Scripta Materialia* **66** (2012) 843.
- [8] Z. You, X. Li, L. Gui, Q. Lu, T. Zhu, H. Gao, L. Lu // *Acta Materialia* **61** (2013) 217.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] P. Gu, M. Dao, Y. Zhu // *Philosophical Magazine* **94** (2014) 1249.
- [12] T.A. Furnish, A.M. Hodge // *APL Materials* **2** (2014) 046112.
- [13] I.J. Beyerlein, X. Zhang, A. Misra // *Annual Review of Materials Research* **44** (2014) 329.
- [14] V. Borovikov, M.I. Mendeleev, A.H. King // *Philosophical Magazine* **94** (2014) 2875
- [15] H. Zhou, X. Li, S. Qu, W. Yang, H. Gao // *Nano Letters* **14** (2014) 5075.
- [16] J. Bian, X. Niu, H. Zhang, G. Wang // *Nanoscale Research Letters* **9** (2014) 335.
- [17] J.W. Yan, G.P. Zhang // *Applied Physics Letters* **102** (2013) 211905.
- [18] R. Niu, K. Han // *Scripta Materialia* **68** (2013) 960.
- [19] J. Wang, N. Li, O. Anderoglu, X. Zhang, A. Misra, J.Y. Huang, J.P. Hirth // *Acta Materialia* **58** (2010) 2262.
- [20] H. Mirkhani, S.P. Joshi // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **68** (2014) 107.
- [21] Z.J. Jie, X. FangDa, Y. YongDa, S. Tao // *Chinese Science Bulletin* **58(6)** (2013) 684.

- [22] Y. Wei // *Materials Science and Engineering: A* **528** (2011) 1558.
- [23] J. Wang, F. Sansoz, J. Huang, Y. Liu, S. Sun, Z. Zhang, S.X. Mao // *Nature Communications* **4** (2013) 1742.
- [24] S. Zhong, T. Koch, M. Wang, T. Scherer, S. Walheim, H. Hahn, T. Schimmel // *Small* **5** (2009) 2265.
- [25] D. Jang, X. Li, H. Gao, J.R. Greer // *Nature Nanotechnology* **7** (2012) 594.
- [26] L. Liu, J. Wang, S.K. Gong, S.X. Mao // *Scientific Reports* **4** (2014) 4397.
- [27] H.F. Zhou, S.X. Qu // *Nanotechnology* **21** (2010) 35706.
- [28] H.F. Zhou, S.X. Qu, W. Yang // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **18** (2010) 65002.
- [29] L.L. Zhu, H.H. Ruan, X.Y. Li, M. Dao, H.J. Gao, J. Lu // *Acta Materialia* **59** (2011) 5544.
- [30] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Reviews on Advanced Materials Science* **37** (2014) 29.
- [31] R.G. Irwin // *J. Appl. Mech.* **24** (1957) 361.
- [32] *Mechanics of Fracture and Strength of Materials*, vol. 2, ed. by V.V. Panasyuk (Naukova Dumka, Kiev, 1988).
- [33] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Materials Physics and Mechanics* **8** (2009) 155.
- [34] N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, E.C. Aifantis // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **58** (2010) 1088.
- [35] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, A.E. Romanov, P. Klimanek // *Physica Status Solidi A* **193** (2002) 35.
- [36] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, vol. 9, ed. by F.R.N. Nabarro (North-Holland, Amsterdam, 1992), p. 191.