

## ОБРАЗОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННЫХ НАНОДВОЙНИКОВ НА ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН С ДИСКЛИНАЦИЯМИ В НАНОМАТЕРИАЛАХ

И.А. Овидько<sup>1,2</sup>, Н.В. Скиба<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург 195215, Россия

<sup>2</sup>Математико-механический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет  
Санкт-Петербург 198504, Россия

<sup>3</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Россия  
e-mail: ovidko@gmail.com

Предложена теоретическая модель, которая описывает зарождение нанодвойников на локально искаженных границах зерен, содержащих зернограницные дисклинации в деформируемых нанокристаллических и ультрамелкозернистых материалах. В рамках модели зарождение нанодвойника реализуется за счет кооперативной эмиссии частичных дислокаций из сегмента границы зерна, в котором имеется зернограницная дисклинация. Рассчитаны энергетические характеристики такого процесса зарождения нанодвойников. Также, определены критические значения внешнего сдвигового напряжения необходимые для реализации данного процесса зарождения деформационных нанодвойников в нанокристаллических и ультрамелкозернистых материалах.

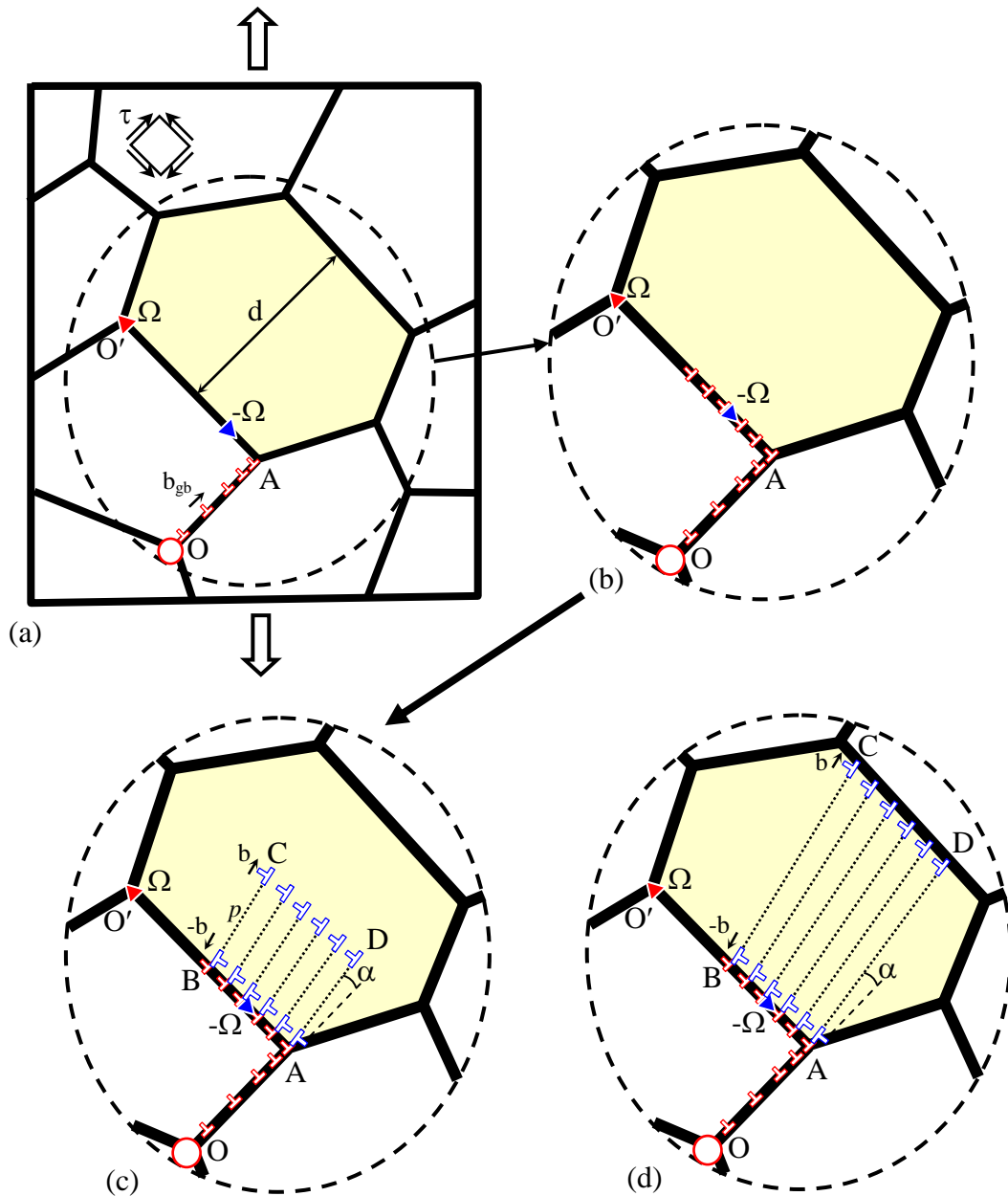
### 1. Введение

Нанокристаллические и ультрамелкозернистые материалы (далее - наноматериалы) обычно характеризуются очень высокой прочностью и в некоторых случаях демонстрируют функциональную пластичность при комнатной температуре, что чрезвычайно привлекательно для широкого круга технологий [1-8]. Замечательные механические свойства наноматериалов задаются особенностями их структуры. В частности, в наноматериалах, вследствие их малого размера зерен и присутствия ансамблей границ зерен высокой плотности, часто активируются специфические механизмы пластической деформации, которые отличны от решеточного дислокационного скольжения (доминирующей моды деформации в крупнозернистых поликристаллах). Одним из таких механизмов служит наблюдаемое на эксперименте деформационное двойникование в наноматериалах [9-15]. Согласно экспериментальным данным, а также результатам компьютерного моделирования и теоретических работ, в наноматериалах деформационные двойники зарождаются преимущественно на границах зерен [9-18], в отличие от доминирующего зарождения двойников во внутренних областях зерен в крупнозернистых поликристаллах.

Известно, что процесс зарождения и роста деформационных двойников связан со скольжением частичных дислокаций по ряду соседних параллельных плоскостей  $\{111\}$ . Таким образом, для образования протяженной двойниковой прослойки на границе зерна требуется, чтобы частичные дислокации уже существовали в границе зерна или образовывались в результате трансформации зернограницных дислокаций на каждой плоскости скольжения, что маловероятно реализуется в реальности. На данный момент



зернограничная  $-\Omega$ -дисклинация изменяет угол разориентировки вдоль границы зерна  $AO'$  (Рис. 1b).



**Рис. 1.** (а) Модель нанокристаллического образца, содержащего скопление зернограничных дислокаций  $AO$  и диполь зернограничных  $\pm\Omega$ -дисклинаций. (b) Образование стенки зернограничных дислокаций  $AB$  в результате перемещения головных дислокаций скопления  $AO$  вдоль границы зерна  $AO'$ . (c) Зарождение нанодвойника  $ABCD$  за счет кооперативного испускания группы  $CD$  частичных дислокаций из сегмента  $AB$  границы зерна  $AO'$ . (d) Пересечение зерна группой  $CD$  частичных дислокаций.

Таким образом, плоскости скольжения, прилегающие границе зерна  $AO'$  не являются параллельными, а повернуты на некоторый угол относительно друг друга. Далее, под действием внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  происходит расщепление стенки  $AB$  зернограничных  $b_{gb}$ -дислокаций на неподвижные зернограничные дислокации и подвижные частичные дислокации, которые способны скользить вдоль



Запишем выражение для разности энергий  $\Delta W$  :

$$\Delta W = E_{\Sigma}^b + E_{\Sigma}^{\Delta-b} + E_{\Sigma}^{\Omega-b} + E_{\Sigma}^{p-b} + E_{\Sigma}^{b-b} + E_{\Sigma}^{\gamma} + E_{\Sigma}^{\tau}, \quad (1)$$

где  $E_{\Sigma}^b$  – суммарная собственная энергия  $n$  диполей частичных  $\pm b$ -дислокаций;  $E_{\Sigma}^{\Delta-b}$  – суммарная энергия упругого взаимодействия между стенкой  $AB$  зернограничных дислокаций и  $n$  диполями частичных дислокаций;  $E_{\Sigma}^{\Omega-b}$  – суммарная энергия упругого взаимодействия между диполем  $\pm\Omega$ -дисклинаций и  $n$  диполями частичных дислокаций;  $E_{\Sigma}^{p-b}$  – суммарная энергия упругого взаимодействия между скоплением дислокаций  $OA$  и  $n$  диполями частичных дислокаций;  $E_{\Sigma}^{b-b}$  – суммарная энергия всех упругих парных взаимодействий между  $n$  диполями частичных  $\pm b$ -дислокаций;  $E_{\Sigma}^{\gamma}$  – суммарная энергия двойниковых границ  $AD$  и  $BC$ ;  $E_{\Sigma}^{\tau}$  – суммарная энергия взаимодействия внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  с  $n$  диполями частичных  $\pm b$ -дислокаций.

Полная собственная энергия  $E_{\Sigma}^b$   $n$  диполей частичных  $\pm b$ -дислокаций представляет собой сумму их собственных энергий в бесконечном изотропном твердом теле [25]:

$$E_{\Sigma}^b = nDb^2 \left( \ln \frac{p-r_c}{r_c} + 1 \right), \quad (2)$$

где  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ ,  $G$  – модуль сдвига,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $r_c \approx b$  – радиус обрезания поля напряжений ядра частичных  $\pm b$ -дислокаций.

Энергия упругого взаимодействия  $E_{\Sigma}^{\Delta-b}$  может быть рассчитана, как работа по зарождению  $n$  диполей частичных  $\pm b$ -дислокаций в поле сдвиговых напряжений диполя  $\pm\omega$ -дисклинаций (которым моделируется стенка зернограничных дислокаций  $AB$ ). Такая энергия задается выражением (см., например, [26]):

$$E_{\Sigma}^{\Delta-b} = \frac{Db\omega}{2} \sum_{i=1}^n \left( (y_i - L \cos \alpha) \ln \left[ 1 + \frac{p^2 - 2Lp \sin \alpha}{L^2 + y_i^2 - 2Ly_i \cos \alpha} \right] - y_i \ln \left[ 1 + \frac{p^2}{y_i^2} \right] \right), \quad (3)$$

где  $L = (n-1)\delta / \cos \alpha$  - плечо дисклинационного диполя  $AB$ ,  $\omega = 2 \arctan(b_{gb} \cos \alpha / 2\delta)$  - мощность дисклинационного диполя  $AB$ ,  $y_i = h_i / \cos \alpha$ ,  $h_i = (i-1)\delta$ , где  $i = 1, 2, 3, \dots, n$ .

Энергия упругого взаимодействия  $E_{\Sigma}^{\Omega-b}$  рассчитывается аналогично предыдущему случаю как работа по зарождению  $n$  диполей частичных  $\pm b$ -дислокаций в поле сдвиговых напряжений диполя  $\pm\Omega$ -дисклинаций (см., например, [26]):

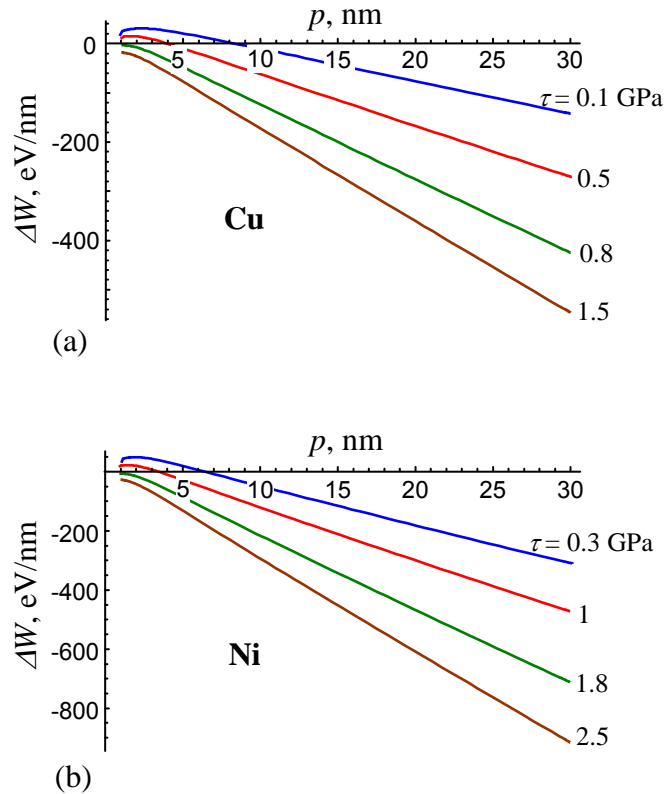
$$E_{\Sigma}^{\Omega-b} = \frac{Db\Omega}{2} \sum_{i=1}^n \left( (y_i - L_0 \cos \alpha) \ln \left[ 1 + \frac{p^2 - 2L_0p \sin \alpha}{L_0^2 + y_i^2 - 2L_0y_i \cos \alpha} \right] - (y_i - l \cos \alpha) \ln \left[ 1 + \frac{p^2 - 2lp \sin \alpha}{l^2 + y_i^2 - 2ly_i \cos \alpha} \right] \right), \quad (4)$$

где  $L_0 \approx d - l/2$  - плечо диполя  $\pm\Omega$ -дисклинаций,  $l = (n-1)\delta / \cos \alpha$ .

Энергия упругого взаимодействия  $E_{\Sigma}^{p-b}$  рассчитывается как работа по



сдвигового напряжения определяет минимальную величину внешнего сдвигового напряжения  $\tau$ , при котором становится возможным зарождение нанодвойника за счет одновременного испускания группы  $CD$   $n$  частичных  $b$ -дислокаций из сегмента  $AB$  локально искаженной границы зерна  $AO'$  (Рис. 1с и d). Такие величины напряжения не характерны для обычных квазистатических режимов деформирования меди и никеля. Вместе с тем, они являются обычными для высокоскоростной деформации и деформирования при сверхвысоком гидростатическом давлении.



**Рис. 2.** Зависимость разности энергий  $\Delta W$  от расстояния  $p$ , пройденного в теле зерна частичными  $b$ -дислокациями при различных значениях внешнего сдвигового напряжения  $\tau = 0.1, 0.5, 0.8$  и  $1.5$  GPa для случая (a) Cu и  $\tau = 0.3, 1, 1.8$  и  $2.5$  GPa для случая (b) Ni.

Критическое значение  $\tau_c$  сдвигового напряжения может быть точно определено из следующих условий  $\Delta W(p = p') = 0$ , где  $p' = 1 \text{ nm}$ ,  $\Delta W|_{p > p'} < 0$  и  $\left. \frac{\partial \Delta W}{\partial p} \right|_{p > p'} \leq 0$ .

Следует отметить, что в случае выполнения неравенств  $\Delta W'_n|_{p > p'} < 0$  и  $\left. \frac{\partial \Delta W'_n}{\partial p} \right|_{p > p'} < 0$

зависимости разности энергий  $\Delta W(p)$  от расстояния  $p$ , пройденного группой  $CD$  частичных дислокаций в теле зерна, находятся в области отрицательных значений и монотонно убывают. Это означает, что группа  $CD$  из  $n$  частичных  $b$ -дислокаций беспрепятственно пересекает зерно и останавливается у противоположной границы зерна, пройдя расстояние  $p \approx d$ . Случай, когда выполняются условия  $\Delta W|_{p > p'} < 0$ ,

$\left. \frac{\partial \Delta W}{\partial p} \right|_{p = p_{eq}} = 0$  и  $\left. \frac{\partial^2 \Delta W}{\partial p^2} \right|_{p = p_{eq}} > 0$  означает, что на зависимостях  $\Delta W(p)$  имеются точки





зарождения и эволюции нанодвойников. Критические значения сдвигового напряжения, необходимые для реализации процесса зарождения нанодвойников на локально искаженных границах зерен с зернограницными дисклинациями в деформируемых наноматериалах, велики (Рис. 3). Такие величины напряжения не характерны для обычных квазистатических режимов деформирования меди и никеля. Вместе с тем, они являются обычными для высокоскоростной деформации и деформирования при сверхвысоком гидростатическом давлении.

*Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда (проект № 14-29-00199).*

## Литература

- [1] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Acta Materialia* **53** (2005) 1.
- [2] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Materialia* **55** (2007) 4041.
- [3] G.J. Weng // *Reviews on Advanced Materials Science* **19** (2009) 41.
- [4] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progress in Materials Science* **54** (2009) 689.
- [5] B. Farrok, A.S. Khan // *International Journal of Plasticity* **25** (2009) 715.
- [6] R.A. Andrievski // *Reviews on Advanced Materials Science* **22** (2009) 1.
- [7] R.B. Figueiredo, T.G. Langdon // *Reviews on Advanced Materials Science* **26** (2010) 249.
- [8] X. Zhang, K.E. Aifantis // *Reviews on Advanced Materials Science* **26** (2010) 74.
- [9] X.-L. Wu, Y.T. Zhu, E. Ma // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 121905.
- [10] X.-L. Wu, E. Ma // *Materials Science and Engineering A* **483-484** (2008) 84.
- [11] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.L. Wu // *Progress in Materials Science* **57** (2012) 1.
- [12] Y.T. Zhu, J. Narayan, J.P. Hirth, S. Mahajan, X.-L. Wu, X.Z. Liao // *Acta Materialia* **57** (2009) 3763.
- [13] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.-L. Wu // *JOM* **60** (2008) 60.
- [14] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu // *Applied Physics Letters* **83** (2003) 5062.
- [15] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov // *Applied Physics Letters* **84** (2004) 592.
- [16] S.V. Bobylev, M.Yu Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B* **73** (2006) 064102.
- [17] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Physical Review B* **74** (2006) 172107.
- [18] Y.T. Zhu, X.L. Wu, X.Z. Liao, J. Narayan, S.N. Mathaudhu, L.J. Kecskes // *Applied Physics Letters* **95** (2009) 031909.
- [19] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Scripta Materialia* **71** (2014) 36.
- [20] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *International Journal of Plasticity* **62** (2014) 50.
- [21] R.Z. Valiev, I.V. Aleksandrov, *Nanostructured Materials Prepared under Severe Plastic Deformation* (Logos, Moscow, 2000).
- [22] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, *Physical Mechanics of Deformed Nanostructures*, Vol. 1: *Nanocrystalline Materials* (Yanus, St. Petersburg, 2003).
- [23] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro (North Holland, Amsterdam, 1992), p. 191.
- [24] M. Murayama, J.M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki // *Science* **295** (2002) 2433.
- [25] M.Yu. Gutkin, A.L. Kolesnikova, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* **12** (2002) 47.
- [26] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Philosophical Magazine* **88** (2008) 1137.
- [27] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Acta Materialia* **51** (2003) 4059.
- [28] J.D. Eshelby, F.C. Frank, F.R.N. Nabarro // *Philosophical Magazine* **42** (1951) 351.
- [29] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [30] S. Kibey, J.B. Liu, D.D. Johnson, H. Sehitoglu // *Acta Materialia* **55** (2007) 6843.

# NUCLEATION OF DEFORMATION NANOTWINS AT GRAIN BOUNDARIES CONTAINING DISCLINATIONS IN NANOMATERIALS

I.A. Ovid'ko<sup>1,2</sup>, N.V. Skiba<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup>Department of Mathematics and Mechanics, St. Petersburg State University,  
St. Petersburg, 198504, Russia

<sup>3</sup>Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,  
Bolshoj 61, Vasilievskii Ostrov, St. Petersburg, 199178, Russia

**Abstract.** A theoretical model is suggested which describes nucleation of nanoscale twins at locally distorted grain boundaries containing disclinations in nanocrystalline and ultrafine-grained materials. Within the model, nucleation of a nanotwin occurs through cooperative emission of partial dislocations from a grain boundary segment containing a disclination. We calculated the energy characteristics of the nanotwin nucleation process in question. Also, we revealed critical values of the external shear stress needed for realization of the nanotwin nucleation process in nanocrystalline and ultrafine-grained materials.

## **Acknowledgements**

*This work was supported by the Russian Science Foundation (Research Project 14-29-00199).*

## **References**

- [1] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // *Acta Materialia* **53** (2005) 1.
- [2] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Materialia* **55** (2007) 4041.
- [3] G.J. Weng // *Reviews on Advanced Materials Science* **19** (2009) 41.
- [4] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progress in Materials Science* **54** (2009) 689.
- [5] B. Farrok, A.S. Khan // *International Journal of Plasticity* **25** (2009) 715.
- [6] R.A. Andrievski // *Reviews on Advanced Materials Science* **22** (2009) 1.
- [7] R.B. Figueiredo, T.G. Langdon // *Reviews on Advanced Materials Science* **26** (2010) 249.
- [8] X. Zhang, K.E. Aifantis // *Reviews on Advanced Materials Science* **26** (2010) 74.
- [9] X.-L. Wu, Y.T. Zhu, E. Ma // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 121905.
- [10] X.-L. Wu, E. Ma // *Materials Science and Engineering A* **483-484** (2008) 84.
- [11] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.L. Wu // *Progress in Materials Science* **57** (2012) 1.
- [12] Y.T. Zhu, J. Narayan, J.P. Hirth, S. Mahajan, X.-L. Wu, X.Z. Liao // *Acta Materialia* **57** (2009) 3763.
- [13] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.-L. Wu // *JOM* **60** (2008) 60.
- [14] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu // *Applied Physics Letters* **83** (2003) 5062.
- [15] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov // *Applied Physics Letters* **84** (2004) 592.
- [16] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B* **73** (2006) 064102.

- [17] M.Yu Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Physical Review B* **74** (2006) 172107.
- [18] Y.T. Zhu, X.L. Wu, X.Z. Liao, J. Narayan, S.N. Mathaudhu, L.J. Kecskes // *Applied Physics Letters* **95** (2009) 031909.
- [19] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Scripta Materialia* **71** (2014) 36.
- [20] I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *International Journal of Plasticity* **62** (2014) 50.
- [21] R.Z. Valiev, I.V. Aleksandrov, *Nanostructured Materials Prepared under Severe Plastic Deformation* (Logos, Moscow, 2000).
- [22] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, *Physical Mechanics of Deformed Nanostructures*, Vol. 1: *Nanocrystalline Materials* (Yanus, St. Petersburg, 2003).
- [23] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, In: *Dislocations in Solids*, ed. by F.R.N. Nabarro (North Holland, Amsterdam, 1992), p. 191.
- [24] M. Murayama, J.M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki // *Science* **295** (2002) 2433.
- [25] M.Yu. Gutkin, A.L. Kolesnikova, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* **12** (2002) 47.
- [26] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Philosophical Magazine* **88** (2008) 1137.
- [27] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Acta Materialia* **51** (2003) 4059.
- [28] J.D. Eshelby, F.C. Frank, F.R.N. Nabarro // *Philosophical Magazine* **42** (1951) 351.
- [29] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [30] S. Kibey, J.B. Liu, D.D. Johnson, H. Sehitoglu // *Acta Materialia* **55** (2007) 6843.