

КОНКУРЕНЦИЯ МЕЖДУ ПРОЦЕССАМИ НАНОМАСШТАБНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ ВБЛИЗИ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В НАНОКЕРАМИКАХ

И.А. Овидько^{1,2*}, Н.В. Скиба^{1,2}

¹ФГБУН Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
Большой пр. 61, Вас. Остров, Санкт-Петербург, 199178, Россия

²Математико-механический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет,
Университетский проспект 28, Старый Петергоф, Санкт-Петербург, 198504, Россия

*e-mail: ovidko@gmail.com

Аннотация. Предложена теоретическая модель, описывающая конкуренцию процессов наномасштабной пластической деформации и разрушения в случае испускания частичных дислокаций границами зерен и зарождения нанотрещин на зернограничных дисклинациях в деформируемых нанокристаллических материалах. На примере нанокристаллического карбида кремния (SiC), деформируемого при высоких температурах, теоретически выявлено, что испускание дислокаций Шокли из границ зерен с диполями дисклинаций представляет собой энергетически выгодный процесс в определенных интервалах параметров дефектной структуры. Проведено сравнение энергетических характеристик конкурирующих процессов испускания частичных дислокаций и зарождения нанотрещин в полях напряжений диполей зернограничных дисклинаций. Показано, что в определенных условиях испускание частичных дислокаций служит эффективным каналом релаксации полей напряжений диполей дисклинаций и, тем самым, препятствует зарождению нанотрещин, повышая пластические свойства нанокристаллических материалов.

1. Введение

Нанокристаллические материалы (НКМ) обычно имеют высокие показатели прочности и, вместе с тем, характеризуются низкой пластичностью [1-7]. Эти механические характеристики во многом обусловлены наномасштабными эффектами и влиянием границ раздела, которые также задают эффективное действие специфических механизмов пластической деформации в НКМ. Подобными специфическими механизмами, в частности, являются межзеренное скольжение, ротационная деформация и двойникование [1-7]. Эти механизмы пластической деформации эффективно реализуются при высоких значениях внешнего напряжения, которые могут вызвать зарождение нанотрещин, уменьшающих пластичность НКМ [8, 9]. Например, согласно представлениям [10], межзеренное скольжение приводит к формированию зернограничных дисклинаций, поля упругих напряжений которых способны инициировать зарождение нанотрещин в деформируемых наноматериалах. Данный пример иллюстрирует конкуренцию между процессами наномасштабной пластической деформации и разрушения в НКМ, которая определяющим образом влияет на пластичность таких материалов и представляет особый интерес для исследований.

испускание краевых 90° -дислокаций Шокли в нанокристаллических материалах с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой. Такие частичные дислокации характеризуются модулем вектора Бюргерса $b = a/\sqrt{6}$, где a - параметр решетки.

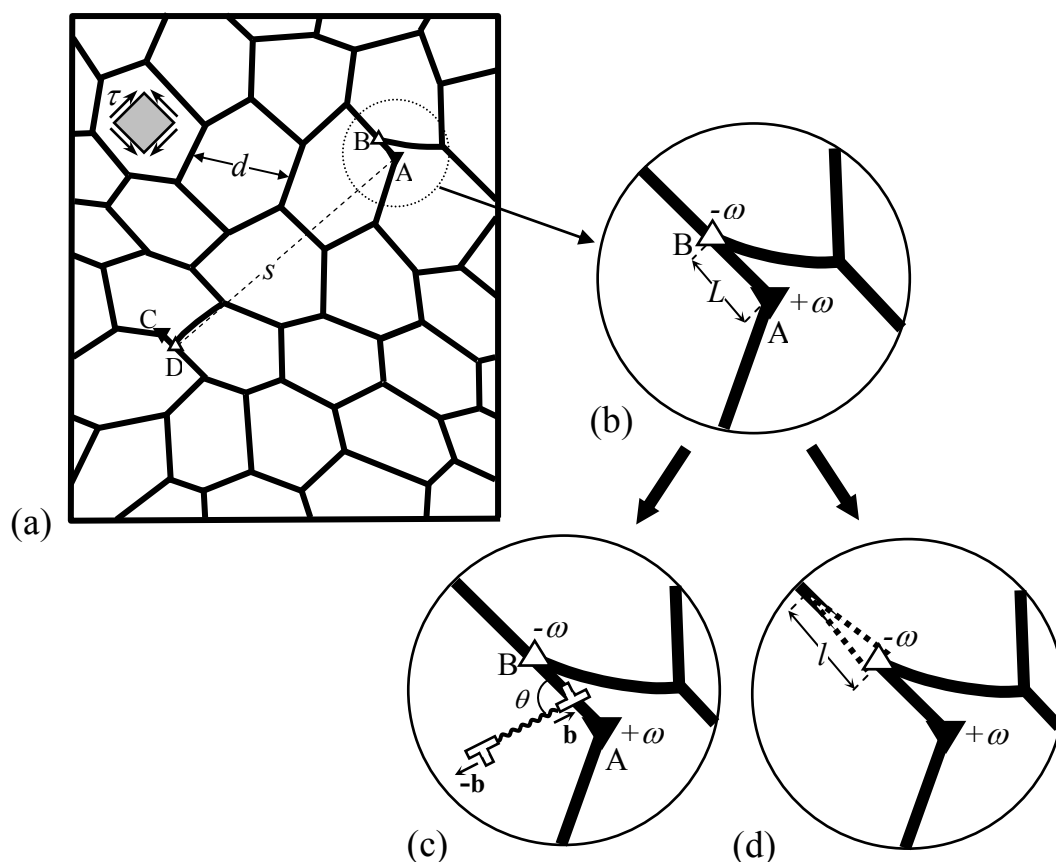


Рис. 1. Исходная 2-мерная модель нанокристаллического образца с квадруполем зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций $ABCD$, образовавшихся в результате межзеренного скольжения вдоль границ зерен AB и CD (а). Вставка с увеличенным фрагментом нанокристаллического материала, в котором находится диполь зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций AB (b). Испускание частичной $(-b)$ -дислокации из сегмента границы зерна, содержащей диполь зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций AB (c). Зарождение нанотрещины в поле напряжений диполя зернограничных $\pm \omega$ -дисклинаций (d).

Рассматриваемый дислокационный диполь состоит из неподвижной b -дислокации (локализованной в границе AB) и подвижной $(-b)$ -дислокации, которая движется в теле зерна вдоль кристаллографической плоскости, ориентированной под углом θ относительно плоскости границы AB (Рис. 1c). Позади $(-b)$ -дислокации формируется дефект упаковки с удельной энергией γ_{st} и длиной p , которая равна расстоянию, пройденному $(-b)$ -дислокацией. Ниже мы рассмотрим энергетические характеристики данного процесса.

3. Энергетические характеристики испускания частичной дислокации из границы зерна, содержащей диполь зернограничных дисклинаций

Испускание решеточной $(-b)$ -дислокации (Рис. 1c) характеризуется разностью энергий $\Delta W = W_2 - W_1$, где W_1 - энергия системы в начальном состоянии, содержащем только

Подставляя формулы (2)-(6) в формулу (1), находим следующее выражение для характеристической разности энергий ΔW :

$$\Delta W = \frac{Db\omega}{2} \left\{ (h - l \sin \theta) \left(\ln \left[1 + \frac{p^2 + 2lp \cos \theta}{l^2 + h^2 - 2lh \sin \theta} \right] - \ln \left[1 + \frac{p^2 - 2sp + 2lp \cos \theta}{l^2 + s^2 + h^2 - 2l(h \sin \theta + s \cos \theta)} \right] \right) + h \ln \frac{h^2((s-p)^2 + h^2)}{(s^2 + h^2)(p^2 + h^2)} \right\} + Db^2 \left(\ln \frac{p - r_c}{r_c} + 1 \right) + \gamma_{st} p + \tau pb \cos 2\theta. \quad (7)$$

Проведем анализ зависимости разности энергий ΔW от параметров системы. Расчет будем проводить на примере кубической фазы нанокристаллического карбида кремния SiC при повышенных температурах, при которых возможно решеточное скольжение. В расчетах будем использовать следующие значения параметров $G = 217$ GPa [16], $\nu = 0.23$ [16], $a = 0.436$ nm [17], $\gamma_{st} = 2$ mJ/m² [17] и $b \approx 0.178$ nm [17]. Значение сдвигового напряжения τ положим равным 2.5 GPa. Такое значение, как следует из оценок в работе [18], требуется для зарождения, рассматриваемых нами диполей зернограничных $\pm\omega$ -дисклинаций AB и CD . В качестве среднего размера зерна d выберем значение $d = 30$ nm. Расстояние s между дисклинационными диполями AB и CD , составляющими квадруполь, положим равным $s = 3d$, а плечи L этих диполей выберем равными $L = 1$ nm. Расстоянием h выберем равным $h = L/2$. На Рис. 2 представлены зависимости уровней разности энергии ΔW от расстояния p и угла θ . Из этих зависимостей видно, что в интервале углов $65^\circ < \theta < 95^\circ$ испускание дислокаций Шокли является энергетически выгодным и сопровождается постоянным понижением энергии с увеличением расстояния p , то есть по мере продвижения частичной ($-b$)-дислокации в теле зерна. Также, отдельные расчеты (которые здесь не приводятся) показали, что испускание полных решеточных дислокаций является энергетически невыгодным в рассматриваемом нами диапазоне параметров дефектной структуры.

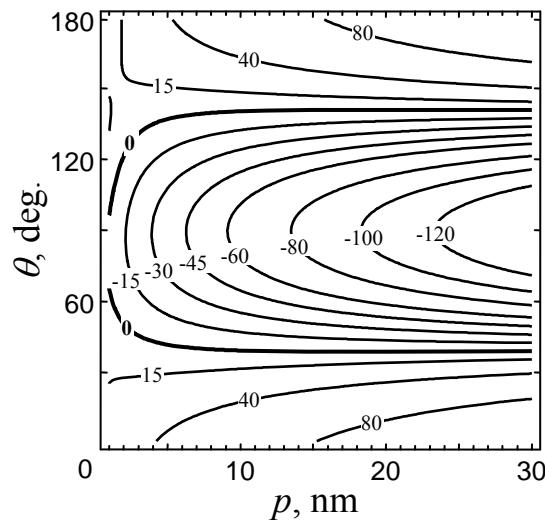


Рис. 2. Зависимости уровней разности энергии ΔW от расстояния p и угла θ на примере нанокристаллической керамики SiC при $\omega = 30^\circ$ и $L = 1$ nm.

На Рис. 3 изображено пространство параметров (L, θ) , которое разделено на области, определяющие, где энергетически выгодно зарождаться нанотрещине, а где испускаться частичной $(-b)$ -дислокации при $\omega = 30^\circ$ и $p = 1$ nm. Горизонтальная пунктирная линия отделяет область параметров (L, θ) , в которой зарождение нанотрещины с длиной $l_{e1} = 5a$ энергетически выгодно, от области параметров (L, θ) , в которой это зарождение невыгодно. (Более точно, первая область - это область над пунктирной линией, а вторая область расположена под пунктирной линией.) Для системы с параметрами, значения которых находятся в области I, энергетически выгодно испускаться частичным дислокациям (заштрихованная область), а зарождение нанотрещины энергетически невыгодно (Рис. 3). Для системы с параметрами, значения которых находятся в области II возможно, как зарождение нанотрещины, так и испускание частичных дислокаций (области, закрашенные серым цветом) (Рис. 3). Область III, задает значения параметров (L, θ) , при которых энергетически выгодно зарождение только нанотрещины (Рис. 3). Наконец, в области IV, как зарождение нанотрещин, так и испускание частичных дислокаций являются энергетически невыгодными процессами (Рис. 3). Из зависимостей на Рис. 3 видно, что область I, где возможно только испускание частичных дислокаций, находится в интервале малых значений плеч $0 < L < 2$ nm дисклинационных диполей.

5. Заключение

В настоящей работе, на примере нанокристаллической керамики SiC, было показано, что испускание частичных дислокаций из границ зерен, содержащих зернограницные дислокации, энергетически выгодно в определенном диапазоне параметров системы (в частности, при высоких температурах, при которых в керамиках реализуется решеточное скольжение). Также было проведено сравнение энергетических характеристик испускания дислокаций Шокли и процесса зарождения нанотрещин на зернограницных дисклинациях. В результате анализа конкуренции между исследуемыми процессами наномасштабной деформации и разрушения были определены области параметров системы, при которых испускание частичных дислокаций энергетически предпочтительнее зарождения нанотрещин. В частности, область I значений параметров системы, при которых энергетически выгодно только испускание частичных дислокаций, находится в интервале малых значений плеч $0 < L < 2$ nm дисклинационных диполей (Рис. 3). Таким образом, испускание частичных дислокаций Шокли из границ зерен может служить эффективным микромеханизмом релаксации упругих напряжений, создаваемых зернограницными дисклинациями при межзеренном скольжении. При этом испускание дислокаций Шокли из границ зерен, препятствует зарождению трещин и, следовательно, повышает пластические свойства деформируемых нанокристаллических материалов.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки (контракт 14.740.11.0353 и грант МК-5600.2011.1) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект 12-01-00291-а).

Литература

- [1] K.S. Kumar, S. Suresh, H. Swygenhoven // *Acta Mater.* **51** (2003) 5743.
- [2] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *MRS Bullet.* **29** (2004) 22.
- [3] A. Mukhopadhyay and B. Basu // *Int. Mater. Rev.* **52** (2007) 257.
- [4] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.Th.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.

- [5] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge, Cambridge University Press, 2007).
- [6] E.C. Aifantis // *Mater. Sci. Eng. A* **503** (2009) 190.
- [7] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progr. Mater. Sci.* **54** (2009) 689.
- [8] H. Li, F. Ebrahimi // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 4307.
- [9] I.A. Ovid'ko // *J. Mater. Sci.* **42** (2007) 1694.
- [10] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phys. Rev. B* **77** (2008) 054109.
- [11] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **52** (2004) 1201.
- [12] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 171927.
- [13] С.В. Бобылев // *Физика и механика материалов* **12** (2011) 126.
- [14] A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova // *Progr. Mater. Sci.* **54** (2009) 740.
- [15] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials* (Springer, Berlin, New York, 2004).
- [16] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2007) 184117.
- [17] U. Kaiser, I.I. Khodos // *Phil. Mag. A* **82** (2002) 541.
- [18] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **57** (2009) 2217.
- [19] S.P. Mehandru, A.B. Anderson // *Phys. Rev. B* **42** (1990) 9040.

COMPETITION BETWEEN NANOSCALE PLASTIC DEFORMATION AND FRACTURE PROCESSES NEAR TRIPLE JUNCTIONS OF GRAIN BOUNDARIES IN NANOCERAMICS

I.A. Ovid'ko^{1,2*}, N.V. Skiba^{1,2}

¹Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,
Bolshoj 61, Vasil. Ostrov, St. Petersburg, 199178, Russia

²Mathematics and Mechanics Faculty, St. Petersburg State University
Universitetsky prospekt 28, Peterhof, St. Petersburg, 198504, Russia

*e-mail: ovidko@gmail.com

Abstract. A theoretical model is suggested that describes competition between nanoscale plastic deformation and fracture processes in the situation with dislocation emission from grain boundaries and nanocrack generation at grain boundary disclinations in plastically deformed nanocrystalline materials. In the exemplary case of nanocrystalline silicon carbide (SiC) mechanically loaded at high temperatures, it is theoretically revealed that emission of Shockley dislocations from grain boundaries represents an energetically favorable process in certain ranges of parameters specifying defect structure. We compared the energy characteristics of the competing dislocation emission and nanocrack generation processes in stress fields of disclination dipoles. It is shown that emission of Shockley partials from grain boundaries in certain conditions serves as an effective channel for relaxation of the stress fields of disclination dipoles, in which case the emission process suppresses the nanocrack generation and thereby enhances ductility of nanocrystalline materials.

Acknowledgements

This work was supported in part by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Contract 14.740.11.0353 and grant MK-5600.2011.1) and the Russian Foundation of Basic Research (grant 12-01-00291-a).

References

- [1] K.S. Kumar, S. Suresh, H. Swygenhoven // *Acta Mater.* **51** (2003) 5743.
- [2] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee // *MRS Bullet.* **29** (2004) 22.
- [3] A. Mukhopadhyay and B. Basu // *Int. Mater. Rev.* **52** (2007) 257.
- [4] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.Th.M. De Hosson, E. Ma // *Acta Mater.* **55** (2007) 4041.
- [5] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek, *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications* (Cambridge, Cambridge University Press, 2007).
- [6] E.C. Aifantis // *Mater. Sci. Eng. A* **503** (2009) 190.
- [7] C.S. Pande, K.P. Cooper // *Progr. Mater. Sci.* **54** (2009) 689.
- [8] H. Li, F. Ebrahimi // *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 4307.
- [9] I.A. Ovid'ko // *J. Mater. Sci.* **42** (2007) 1694.
- [10] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phys. Rev. B* **77** (2008) 054109.
- [11] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **52** (2004) 1201.
- [12] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 171927.
- [13] S.V. Bobylev // *Mater. Phys. Mech.* **12** (2011) 126.
- [14] A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova // *Progr. Mater. Sci.* **54** (2009) 740.
- [15] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials* (Springer, Berlin, New York, 2004).
- [16] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao // *Phys. Rev. B* **70** (2007) 184117.
- [17] U. Kaiser, I.I. Khodos // *Phil. Mag. A* **82** (2002) 541.
- [18] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Mater.* **57** (2009) 2217.
- [19] S.P. Mehandru, A.B. Anderson // *Phys. Rev. B* **42** (1990) 9040.