

На правах рукописи



БОБЫЛЕВ Сергей Владимирович

**НАНОМАСШТАБНАЯ ПЛАСТИЧЕСКАЯ ДЕФОРМАЦИЯ И
ТРАНСФОРМАЦИИ ВНУТРЕННИХ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА
В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

Специальности: 01.02.04 — Механика деформируемого твердого тела
01.04.07 — Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт проблем машиноведения Российской академии наук

Научный консультант: **Овидько Илья Анатольевич**
доктор физико-математических наук,
зав. лаб. механики наноматериалов и теории
дефектов ФГБУН Институт проблем
машиноведения Российской академии наук

Официальные оппоненты: **Волков Александр Евгеньевич**
доктор физико-математических наук,
зав. лаб. прочности материалов
ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский
государственный университет»

Мещеряков Юрий Иванович
доктор физико-математических наук, профессор,
зав. лаб. физики разрушения
ФГБУН Институт проблем машиноведения
Российской академии наук

Орлова Татьяна Сергеевна
доктор физико-математических наук,
с.н.с. лаб. физики профилированных кристаллов
ФГБУН Физико-технический институт
им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Уфимский государственный
авиационный технический университет»

Защита состоится 10 октября 2013 года в ____ часов на заседании диссертационного совета Д 002.075.01 в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт проблем машиноведения Российской Академии наук по адресу: 199178, Санкт-Петербург, Большой пр., В.О., д. 61.

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт проблем машиноведения Российской академии наук.

Автореферат разослан " ____ " _____ 2013 года

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор технических наук



В.В. Дубаренко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. К числу актуальных проблем механики и физики деформируемого твердого тела относится описание поведения под действием механической нагрузки поликристаллических материалов, каковыми являются большинство кристаллических веществ, используемых в различных отраслях промышленности. Границы зерен являются неотъемлемыми структурными составляющими поликристаллов и принимают непосредственное участие в формировании их физико-механических свойств. Для некоторых классов материалов роль границ зерен становится исключительно высокой в силу тех или иных причин. Настоящая работа посвящена теоретическому описанию структурных трансформаций границ зерен и процессов деформации с ними связанных в нанокристаллических твердых телах.

Нанокристаллическими материалами называются одно- или многофазные поликристаллические твердые тела с размером зерна менее 100 нм. Свойства нанокристаллов существенно отличаются (зачастую в лучшую сторону) от обычных крупнозернистых поликристаллов. Примером таких свойств, имеющих потенциальное значение для инженерных приложений, являются сверхвысокие пределы текучести и прочности, пониженное относительное удлинение при разрушении, исключительная износостойкость и потенциальная возможность сверхпластичности при более низких температурах и больших скоростях деформации по сравнению с крупнозернистыми поликристаллами.

В силу малости размера зерна нанокристаллических материалов, границы зерен занимают значительный процент объема (иногда до 50%), что коренным образом меняет механизмы, ответственные за формирование макроскопических характеристик твердого тела. Так, практически все механизмы пластической деформации в нанокристаллических металлах контролируются границами зерен. В частности, зернограничное проскальзывание, ползучесть Кобла, ротационная деформация, являются примерами типичных для нанокристаллических материалов механизмов пластической деформации, реализующихся по границам зерен. Стандартная дислокационная пластичность, реализующаяся внутризерненным скольжением решеточных дислокаций, в условиях нанокристаллической структуры также претерпевает значительные изменения. Например, границы зерен способны выступать в несвойственной для крупнозернистых поликристаллов роли эффективных альтернативных источников подвижных дислокаций. В этих условиях, изучение структуры границ зерен и их трансформаций является исключительно важным для понимания процессов происходящих в нанокристаллических материалах.

Последняя глава настоящей диссертации посвящена структурным трансформациям границ зерен в высокотемпературных сверхпроводниках, которые являются другим классом перспективных материалов. Возможность обеспечения сверхпроводимости при значительно более высоких температурах (выше точки кипения азота) по сравнению с классическими металлическими сверхпроводниками (типичные температуры 20К и ниже) трудно переоценить. Важной особенностью высокотемпературных сверхпроводников является подавление электрических сверхпроводящих свойств (обычно называемых транс-

портными), прежде всего критического тока, в поликристаллических сверхпроводниках по сравнению с монокристаллическими сверхпроводниками того же химического состава. Последнее сразу указывает на ключевую роль границ зерен в процессе подавления сверхпроводимости. При этом подавление сверхпроводимости границами зерен является безусловно вредным для высокоточных приложений, в то время как в микроэлектронике механизм управления током через контроль структуры границы зерна может быть основой для создания микроэлектронных устройств. В любом случае, это обуславливает значительный интерес к исследованию структуры границ зерен и их трансформаций в высокотемпературных сверхпроводниках.

Следует отметить, что в случае границ зерен в деформируемых нанокристаллических материалах, доминируют экспериментальные исследования. В то же время теоретические представления о структуре границ зерен и особенно их трансформациях при пластической деформации нанокристаллических металлов развиты совершенно недостаточно. В теории же границ зерен в высокотемпературных сверхпроводниках основное внимание уделяется статической структуре границ, но не их структурным трансформациям, способным существенно, а нередко критическим образом влиять на функциональные свойства сверхпроводников с границами зерен. Это обуславливает актуальность темы предлагаемой диссертационной работы.

Цель работы состоит в построении теоретических моделей, достоверно описывающих процессы наномасштабной пластической деформации и структурные трансформации границ зерен в деформируемых нанокристаллических материалах и высокотемпературных сверхпроводниках.

Для достижения этой цели были поставлены и решены следующие **задачи**:

- построение моделей эмиссии подвижных решеточных дислокаций из границ зерен различных типов (малоугловых, большеугловых, аморфных) и их тройных стыков в деформируемых нанокристаллических металлах и керамиках под действием внешнего механического напряжения, описывающие границы зерен как эффективные дислокационные источники в наноструктурных материалах;
- построение моделей механизмов аккомодации зернограницного скольжения, ведущих к повышению пластичности и вязкости разрушения наноматериалов;
- построение моделей процессов деформации, базирующиеся на концепции наномасштабного идеального пластического сдвига, представляющего собой альтернативу стандартному механизму зарождения дислокаций (решеточных и зернограницных), в наноматериалах с порами и нанопроволоками;
- построение моделей структурных трансформаций границ зерен в высокотемпературных сверхпроводниках, движущей силой которых является релаксация внутренних упругих напряжений, и расчет влияния этих трансформаций на сверхпроводящие транспортные свойства.

Научная новизна. В диссертации впервые получены следующие результаты:

- построены модели специальных механизмов пластической деформации, связанных с эмиссией скользящих дислокаций из границ зерен разных типов (малоугловых, большеугловых и аморфных) и их тройных стыков в деформируемых нанокристаллических металлах и керамиках под действием внешнего напряжения, на основании которых теоретически показано, что распад малоугловой границы способен вызвать цепной распад соседних малоугловых границ с образованием полосы сдвига, в пределах которой локализуется пластическая деформация, большеугловые и аморфные границы являются эффективными источниками частичных дислокаций, а также объяснен экспериментально наблюдаемый факт наличия аномально широких дефектов упаковки в нанокристаллическом алюминии;
- построены теоретические модели аккомодации межзеренного скольжения за счет расщепления и миграции границ зерен, диффузионного переползания зернограницных дислокаций и ротационной деформации в нанокристаллических материалах, предсказывающие существенный рост пластичности и трещиностойкости материала по сравнению со случаем неаккомодированного межзеренного скольжения;
- на базе концепции наномасштабного идеального пластического сдвига, представляющего собой эффективную альтернативу стандартному механизму зарождения дислокаций (решеточных и зернограницных), построены теоретические модели пластической деформации нанопроволок и массивных нанокристаллических материалов с порами, с помощью которых показано, что в условиях экстремально высоких приложенных напряжений механизм наномасштабного идеального пластического сдвига доминирует над стандартным дислокационным зарождением и скольжением;
- построены модели наномасштабных структурных трансформаций границ зерен в высокотемпературных сверхпроводниках, движущей силой которых является релаксация внутренних упругих напряжений, а именно: перераспределение дислокационной плотности вдоль плоскости границ зерен, зарождение нанозерен с 90° границами наклона, неоднородное расщепление дислокаций в фасетированных границах; рассчитано изменение транспортных свойств (критического тока) в результате этих трансформаций.

Научная и практическая значимость работы. Развитые в работе модели процессов наномасштабной пластической деформации и структурных трансформаций границ зерен в нанокристаллических материалах и высокотемпературных сверхпроводниках могут быть использованы в качестве эффективной основы при изучении механизмов пластической деформации и разрушения нанокристаллов и в практических задачах контроля технологических и функциональных свойств материалов. Построенные модели объясняют ряд эффектов, наблюдаемых в эксперименте (формирование полос сдвига и испускание частичных дислокаций в нанокристаллических металлах и керамиках, формирование аномально широких дефектов упаковки в нанокристаллическом алюминии, формирование нанозерен с 90° границами в сверхпроводящих пленках, рас-

щепление дислокаций в фасетированных границах зерен) и предсказывают новые эффекты (повышение пластичности за счет совместного действия зернограницного скольжения и миграции границ зерен, испускание дислокаций порами и деформация нанопроволок посредством идеального пластического сдвига, перераспределение дислокационной плотности в малоугловых границах в напряженных сверхпроводящих пленках). Они способствуют пониманию сути физических процессов, протекающих в реальных неоднородных материалах, и могут рассматриваться как теоретическая основа для совершенствования технологии их производства.

Достоверность результатов и выводов обеспечивается использованием корректных математических методов решения поставленных задач, проведением проверок и предельных переходов к уже известным решениям, сравнением, где это возможно, с результатами экспериментов. Физическая обоснованность построенных моделей подтверждается их соответствием экспериментальным наблюдениям поведения дефектов в нанокристаллических твердых телах.

Основные положения, представленные к защите:

- Модели эмиссии решеточных дислокаций из малоугловых, большеугловых и аморфных границ зерен и тройных стыков в деформируемых нанокристаллических металлах и керамиках под действием внешнего механического напряжения; расчет критического напряжения разрушения малоугловых границ и энергетических характеристик образующихся систем дефектов, определение диапазонов параметров систем, при которых рассматриваемые процессы являются энергетически выгодными.
- Модели механизмов аккомодации зернограницного скольжения посредством миграции границ зерен, диффузионного переползания зернограницных дислокаций и ротационной деформации, ведущие к повышению пластичности и трещиностойкости наноматериалов.
- Модели процессов деформации, базирующиеся на концепции наномасштабного идеального пластического сдвига, представляющего собой альтернативу стандартному механизму зарождения дислокаций (решеточных и зернограницных), расчет условий зарождения дислокаций на порах в наноматериалах и пластического течения в нанопроволоках.
- Модели структурных трансформаций границ зерен в высокотемпературных сверхпроводниках, движущей силой которых является релаксация внутренних упругих напряжений, расчет упругой энергии систем дефектов, образующих границы зерен, определение критических параметров, при которых описываемые трансформации границ зерен энергетически выгодны, расчет влияния этих трансформаций на сверхпроводящие транспортные свойства.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях и семинарах: International Conference on Nanomaterials and Nanotechnologies (Крит, Греция, 2003, 2005), MRS Symposium “Mechanical Properties of Nanostructured Materials and Nanocomposites” (Бостон, США,

2003), International Workshop on Interface Controlled Materials: Research and Design (Санкт-Петербург, Россия, 2004), International Workshop "Mechanics of Advanced Materials" (Санкт-Петербург, Россия, 2006), Международная летняя школа-конференция "Актуальные проблемы механики" (Санкт-Петербург, Репино, Россия, 2006, 2010, 2011), The 2nd International Symposium "Physics and Mechanics of Large Plastic Strains" (Санкт-Петербург, Россия, 2007), XIX Петербургские чтения по проблемам прочности (Санкт-Петербург, Россия, 2010), 2nd International Conference on Materials Modelling (Париж, Франция, 2011), семинарах в Санкт-Петербургском государственном политехническом университете и Институте проблем машиноведения РАН.

Публикации. По теме работы опубликованы 35 научных статей в отечественных и зарубежных журналах, все из которых входят в Перечень ВАК ведущих рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 глав основного текста, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 218 страниц, включая 87 рисунков. Список цитируемой литературы состоит из 318 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулирована основная цель работы, кратко представлены содержание диссертации, сведения о ее апробации и основных публикациях по ее теме, приведены положения, выносимые на защиту.

В первой главе дан обзор литературы, касающейся границ зерен в деформируемых нанокристаллических материалах и поликристаллических высокотемпературных сверхпроводниках. П. 1.1 посвящен границам зерен в наноматериалах. В нем дан обзор механизмов пластической деформации с акцентом на роль границ зерен в процессах пластической деформации. В п. 1.2 рассмотрены механизмы подавления границами зерен транспортных свойств поликристаллических высокотемпературных сверхпроводников. Проведен обзор существующих теоретических моделей, описывающих структуру границ зерен и ее влияние на транспортные свойства высокотемпературных сверхпроводников. В п. 1.3 на основе анализа литературных данных определены задачи настоящей работы.

Вторая глава посвящена теоретическому анализу механизмов пластической деформации, связанных с испусканием скользящих решеточных дислокаций из границ зерен.

Экспериментальные данные [Wei *et al*, Appl. Phys. Lett. 81, 1240 (2002)] наводят на мысль, что распад малоугловых границ зерен может являться эффек-

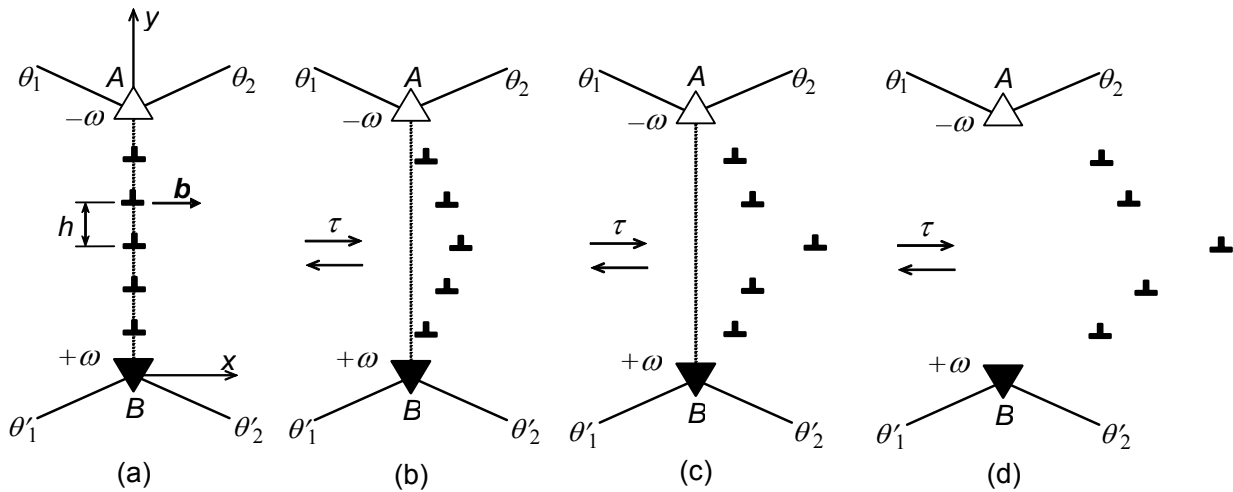


Рис. 1. Малоугловая граница наклона, представляемая в виде стенки краевых дислокаций. (a) В исходном состоянии; (b) после приложения внешнего напряжения τ ; (c) первая дислокация отрывается от границы; (d) полный распад границы.

тивным источником мобильных дислокаций и может быть причиной формирования полос сдвига и изменения формы зерен. Для объяснения этих экспериментальных данных в п. 2.1 предложена теоретическая модель распада малоугловых границ наклона в нанокристаллических металлах. Распад границы рассматривается в терминах дислокационной динамики через описание движения отдельных дислокаций, составляющих малоугловую границу, под действием внешнего поля напряжений. В качестве расчетной модели малоугловой границы наклона с углом разориентировки θ бралась стенка из N периодически упорядоченных краевых дислокаций с вектором Бюргерса \mathbf{b} , обрывающаяся на тройных стыках в нанокристаллическом образце (рис. 1a). Тройные стыки в исходном состоянии полагались полностью скомпенсированными, т.е. угол разориентировки θ находился в компенсационных соотношениях $\theta + \theta_1 + \theta_2 = 0$ и $-\theta + \theta'_1 + \theta'_2 = 0$ с углами разориентировки (θ_1, θ_2) и (θ'_1, θ'_2) границ зерен соседних, соответственно, с верхним и нижним тройными стыками (рис. 1a). Под действием напряжения сдвига τ дислокации смещаются из их исходных позиций (рис. 1a) в новые положения равновесия (рис. 1b). Другими словами, граница прогибается. При некотором критическом значении напряжения τ_c одна из дислокаций, образующих стенку, начинает двигаться, удаляясь от границы (рис. 1c). Как показал дальнейший расчет, освобождение единственной дислокации приводит к распаду всей границы в целом (рис. 1d). В результате группа решеточных дислокаций, освобожденных при распаде границы движется, вызывая локальную пластическую деформацию и образование удлиненного зерна. Согласно экспериментальным данным [Jia *et al*, Acta Mater. 51, 3495 (2003); Wei *et al*, Appl. Phys. Lett. 81, 1240 (2002)], такие удлиненные зерна являются характерными структурными элементами полос сдвига в нанокристаллическом железе.

Следует обратить внимание, что распад границы превращает скомпенсированные тройные стыки в нескомпенсированные двойные (рис. 1d). Верхний и нижний стыки становятся источниками напряжений дисклинационного типа,

характеризуемые дисклинационными мощностями $-\omega = -\theta$ и $\omega = \theta$ соответственно. Таким образом, эти стыки формируют диполь дисклинаций. Поле напряжений диполя дисклинаций эффективно удерживает дислокации, т.е. выступает в качестве сдерживающей силы, препятствующей распаду.

В рамках модели движение дислокаций являлось одномерным (вдоль оси x). Для его описания записывалась система уравнений движения вида:

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} + \beta \frac{dx_i}{dt} = F_i, \quad x_i(0) = 0, \quad \dot{x}_i(0) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

где $m = \rho b^2 / 2$ – эффективная масса дислокаций, ρ – плотность материала, x_i – координата i -й дислокаций в стенке, t – время, β – коэффициент динамического сопротивления кристаллической решетки движению дислокаций (коэффициент вязкости), F_i – сила действующая на i -ю дислокацию со стороны внешнего поля, остальных дислокаций и дисклинационного диполя, располагающегося в тройных стыках. Решение системы (1) позволяет получить набор временных зависимостей $x_i(t)$ для координат дислокаций, анализ которых при переменной величине внешнего напряжения τ и угла разориентировки θ позволяет определить критическое значение τ_c , при котором происходит распад малоугловой границы наклона, для разных значений θ . Расчет на примере нанокристаллического Fe показал, что критическое напряжение τ_c варьируется в диапазоне от 0.5 до 2.5 ГПа при изменении угла разориентировки θ от 1° до 10° . Среднее значение критического напряжения распада $\langle \tau_c \rangle = 1.5$ ГПа совпадает с величиной напряжения течения для нанокристаллического Fe, зарегистрированного в эксперименте [Wei *et al*, Appl. Phys. Lett. 81, 1240 (2002)]. Важным результатом является также тот факт, что критическое напряжение практически не зависит от длины границы (размера зерна). Следовательно, при крупном размере зерна, когда традиционные источники дислокаций действуют при значительно меньших уровнях напряжений, распад малоугловых границ не существенен для процесса пластической деформации; при малом размере зерна, когда обычные источники могут быть подавлены, распад малоугловых границ, напротив, способен стать альтернативным источником подвижных дислокаций.

Аналогичным методом было проанализировано влияние распада малоугловой границы зерна на распад соседних границ. Было показано, что в общем случае такой распад приводит к понижению критических напряжений соседних границ (в отдельных случаях до 40%). Таким образом, распад одной малоугловой границы способен инициировать цепной распад соседних малоугловых границ с образованием плотных ансамблей подвижных дислокаций, носителей пластической деформации.

П. 2.2 посвящен аналогичному рассмотрению трансформаций большеугловых границ зерен. В общем случае большеугловые границы содержат дислокации, связанные с ориентационным несоответствием границы и характеризующиеся малыми векторами Бюргерса (меньше решеточного). Такие дислокации не могут свободно скользить в кристаллической решетке зерна, в отличие от решеточных дислокаций, образующих малоугловые границы, поэтому распад большеугловых границ под действием внешнего напряжения невозможен. Однако, в экспериментах с механически нагруженными нанокристаллическими

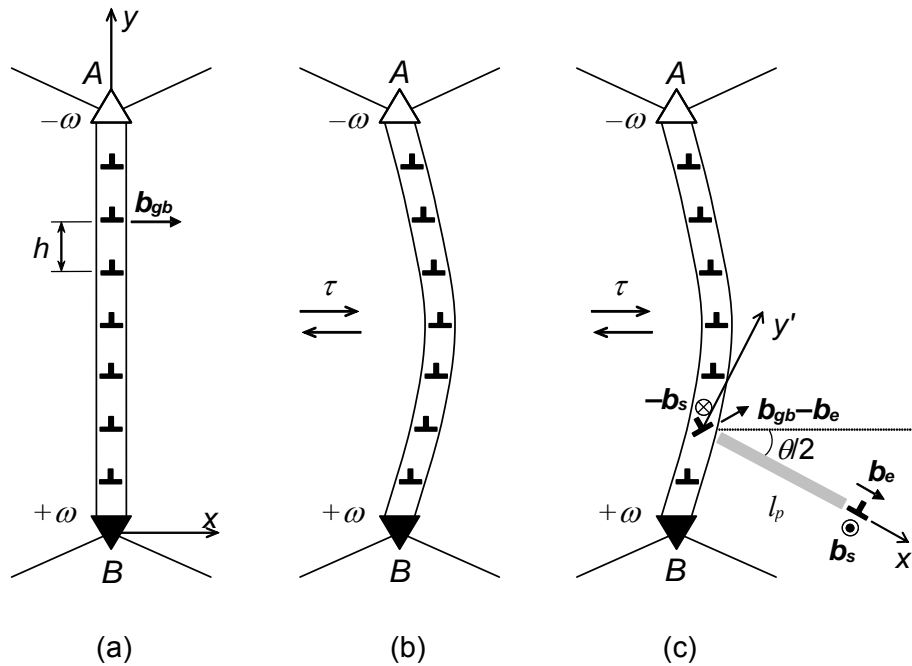


Рис. 2. Модель большеугловой границы наклона. (а) Исходное состояние; (б) прогиб границы под действием внешнего сдвигового напряжения τ ; (с) испускание дислокации Шокли с образованием дефекта упаковки и разностной дислокации на месте исходной зернограницной.

материалами показано, что большеугловые границы способны прогибаться [Kumar *et al*, Acta Mater. 51, 387 (2003)] и испускать частичные дислокации, которые участвуют в процессах деформационного двойникования. Используя подход, развитый для малоугловых границ, были теоретически описаны процессы прогиба и испускания частичных дислокаций (рис. 2) для случая большеугловых границ.

В рамках модели эволюция большеугловой границы зерна в поле сдвиговых напряжений описывалась в два этапа (рис. 2). На первом этапе изначально прямая граница (рис. 2а), образованная стенкой краевых зернограницных дислокаций с вектором Бюргерса \mathbf{b}_{gb} под действием внешней нагрузки прогибается как целое (рис. 2б). Этот этап описывался с помощью уравнений (1) подобно описанию движения дислокаций в малоугловой границе наклона. Движение большеугловой границы описывалось как своего рода миграция, вызываемая внешними напряжениями, приводящая к увеличению длины границы и увеличению ее поверхностной энергии ΔW_{gb} , что, в свою очередь, создает силу F_{gb} , препятствующую дальнейшему прогибу. Решение системы (1) с учетом новой силы F_{gb} позволяет получить равновесные положения дислокаций в прогнутой конфигурации границы (рис. 2б), которые используются как входные данные на втором этапе, где происходит испускание частичных дислокаций.

Мы предполагали, что под действием внешнего напряжения одна из зернограницных дислокаций в границе расщепляется и испускает дислокацию Шокли (частичную дислокацию с краевой и винтовой компонентами, \mathbf{b}_e и \mathbf{b}_s , соответственно), которая при движении оставляет за собой дефект упаковки длиной l_p (рис. 2с), энергию которого обозначим γ . На месте исходной зернограницной дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b}_{gb} после испускания дислокации Шокли остается разностная дислокация с краевой компонентой $\mathbf{b}_{gb} - \mathbf{b}_e$ и винтовой $-\mathbf{b}_s$.

Для оценки выгодности описанного процесса использовался энергетический критерий, т.е. были рассчитаны упругие энергии W_1 и W_2 конфигураций дефектов, показанных на рис. 2b и c, соответственно, и найдено характеристическое изменение упругой энергии $\Delta W = W_2 - W_1 - A_\tau$, сопровождающее процесс эмиссии частичной дислокации (A_τ – работа внешнего поля напряжений по перемещению частичной дислокации). На

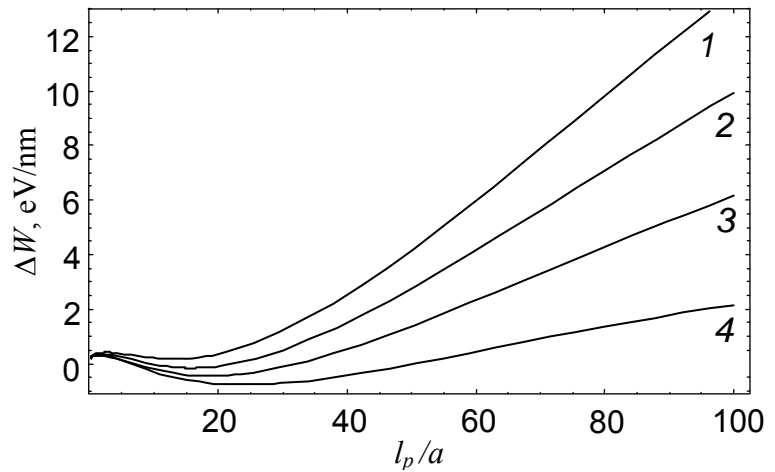


Рис. 3. Зависимости изменения энергии ΔW от длины расщепления l_p для разных значений величины внешнего напряжения: $\tau = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ ГПа (кривые 1, 2, 3, 4, соответственно).

рис. 3 представлены результаты расчетов величины ΔW в зависимости от длины расщепления l_p при разных значениях величин некоторых параметров задачи на примере нанокристаллической Cu. Используя полученные зависимости $\Delta W(l_p)$ можно установить диапазоны значений параметров задачи (величины внешнего напряжения τ , параметров дислокационной структуры границы), при которых энергетически выгодна описываемая трансформация структуры.

В п. 2.3 предложена теоретическая модель, описывающая эмиссию решеточных дислокаций из аморфных межзеренных границ в деформируемых нанокерамиках, развитая на основании имеющихся экспериментальных и теоретических данных [Wang *et al*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 104, 11155 (2007); Szlufarska *et al*, Science 309, 911 (2005)], согласно которым аморфные межзеренные границы в нанокерамиках (а также аморфные слои в аморфно-кристаллических наноламнатах) могут быть альтернативными источниками решеточных дислокаций. Данное предположение было исследовано в рамках двухмерной модели зарождения дислокационного диполя на аморфной границе в нанокристаллической керамике (рис. 4). В качестве таковой рассматривалась граница АВ с длиной p между зернами II и III в системе, показанной на рис. 4a. Под действием приложенного сдвигового напряжения τ в продольном сечении этой аморфной границы происходил пластический сдвиг. В рамках используемого континуального описания пластический сдвиг представлялся как диполь краевых дислокаций (рис. 4b,c). Считалось, что дислокации диполя находятся на краях аморфной границы и по существу принадлежат соответственно примыкающим кристаллическим зернам (I и IV). Это позволило рассматривать диполь как обычные дислокации в кристаллах, способные участвовать в дислокационных реакциях слияния и расщепления, которые важны для переноса пластического течения между различными фазами. Полагалось, что локальная пластическая деформация аморфных межзеренных границ в нанокерамике осуществляется за счет локальных пластических сдвигов. При этом локальные пластические сдвиги происходят пространственно-неупорядоченным образом по всей длине границы и приводят к постепенному увеличению модуля s векторов

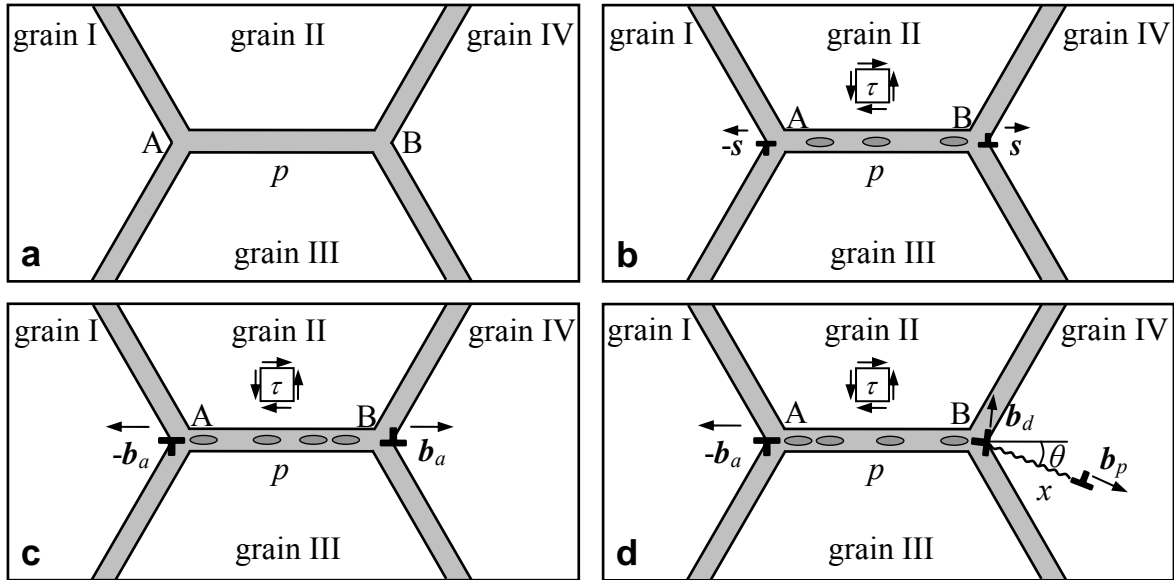


Рис. 4. Генерация дислокационного диполя на аморфной межзеренной границе с последующим испусканием частичной дислокации в соседнее зерно в нанокристаллической керамике. (а) Исходное бездислокационное состояние. Зерна I, II, III, IV разделены аморфными межзеренными границами (серые полосы). (б) Генерация диполя краевых дислокаций с векторами Бюргера $\pm s$ в результате локальных сдвигов (обозначены эллипсами) внутри границы. (в) Дальнейший пластический сдвиг в аморфной межзеренной границе ведет к увеличению векторов Бюргера дислокаций до величины $\pm b_a$. (д) Расщепление одной из дислокаций диполя приводит к формированию остаточной неподвижной дислокации и мобильной частичной дислокации, скользящей внутри зерна IV и оставляющей дефект упаковки за собой (волнистая линия).

Бюргера дислокаций от нуля до некоторой равновесной величины b_a (рис. 4б,в). Краевые дислокации диполя, зарождающегося на аморфной границе, являются концентраторами напряжений, на которых могут зарождаться решеточные дислокации, условия зарождения которых и были исследованы в данной модели.

В рамках модели были найдены выражения для изменения энергии системы, связанные с зарождением диполя (ΔW_1) и испусканием решеточной дислокации (ΔW_2) в следующем виде:

$$\Delta W_1 = Ds^2 \left(\ln \frac{p-s}{s} + 1 \right) - (\tau - \tau_a) s p, \quad (2)$$

$$\Delta W_2 = Db_p \left\{ b_p \left(\ln \frac{x-b_p}{b_p} + 1 \right) + b_a \left[\cos \theta \left(\ln \frac{Lb_p}{px} - 1 \right) - \frac{px \sin^2 \theta}{L^2} \right] \right\} + \gamma x - (\tau - \tau_p) b_p x \cos 2\theta, \quad (3)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, τ_a – предел текучести аморфной фазы, который характеризует ее сопротивление пластическому сдвигу, b_p – модуль вектора Бюргера зарождающейся скользящей дислокации, x и θ – расстояние и угол,

характеризующие испускание дислокации (см. рис. 4d), $L = \sqrt{p^2 + x^2 + 2px \cos \theta}$, γ – удельная энергия дефекта упаковки, τ_p – напряжение Пайерлса. Анализ найденных выражений для энергии позволил сделать вывод, что этот процесс энергетически выгоден и может протекать атермически (безбарьерно) в нанокристаллическом 3C–SiC. Было рассчитано критическое напряжение τ_c (рис. 5), при котором происходит переход от деформации межзеренным проскальзыванием к деформации путем внутризеренного дислокационного скольжения на примере карбида кремния, которое уменьшается с увеличением длины границы (фактически, размера зерна). Или, другими словами, переход от межзеренного проскальзывания к внутризеренному дислокационному скольжению затрудняется по мере уменьшения размера зерна.

Если все вышерассмотренные модели являются двухмерными, то в п. 2.4 развита трехмерная теоретическая модель, описывающая эмиссию петель частичных дислокаций из границ зерен, сопровождающуюся формированием дефектов упаковки в ГЦК металлах. В большинстве случаев переход к трехмерному рассмотрению связан со значительными вычислительными осложнениями, неоправданными с точки зрения величины получаемых поправок к результатам двухмерных теорий. Однако в некоторых случаях трехмерный анализ позволяет объяснить тонкие эффекты, необъяснимые в рамках двухмерных моделей. В данном случае трехмерная модель позволяет описать экспериментально наблюдаемый факт наличия аномально широких (ширина от 1.5 до 11 раз больше равновесной в бесконечной среде) дефектов упаковки в нанокристаллическом алюминии [Liao *et al*, Appl. Phys. Lett. 84, 3564].

Теория дислокационных петель позволяет более точный учет энергии дефектов по сравнению с предшествующими работами, а также позволяет естественным образом ввести в задачу размер зерна. Предложенная модель описывает гетерогенное зарождение дислокаций, т.е. зарождение дислокационных дефектов на других дислокациях, существующих внутри границ зерен. Исходная дислокация может, например, возникать в процессе межзеренного проскальзывания, которое трактуется как процесс скольжения зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса, параллельными плоскости границы зерна.

Рассматривался процесс испускания петель частичных дислокаций границей зерна в нанокристаллическом Al с образованием полос дефектов упаковки между испущенными дислокациями. Система в исходном состоянии представляет собой дислокационную петлю ABCD с вектором Бюргерса \mathbf{b} , которая ох-

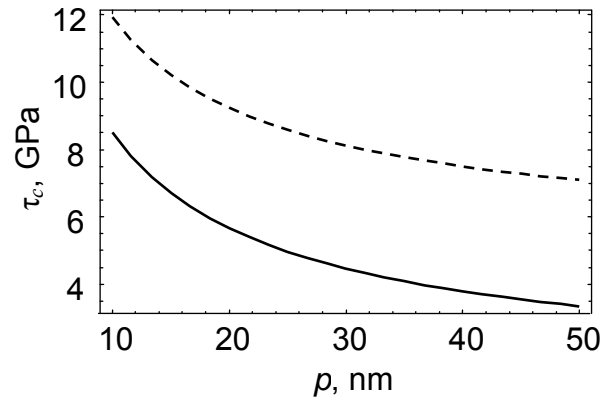


Рис. 5. Зависимость критического напряжения τ_c (при котором происходит переход от деформации межзеренным проскальзыванием к деформации путем внутризеренного дислокационного скольжения) от длины аморфной границы p для $\theta = 20^\circ$, $\tau_a = 1$ ГПа и 5 ГПа (сплошная и пунктирные кривые соответственно).

ватывает зерно целиком, залегая вдоль границы зерна (рис. 6). На сегменте АВ описываемой петли под действием внешнего напряжения τ происходило очередное зарождение петель частичных дислокаций (AabV и Aa'b'V) с векторами Бюргерса b_1 и b_2 (рис. 6b,c). Затененные области AabV (рис. 6b) и a'abb' (рис. 6c) являются дефектом упаковки. Комбинация величин b_1 , b_2 и плоскости залегания петель определяют действующую систему скольжения. Рассматривались две системы скольжения: система, называемая 60° -I, с векторами Бюргерса $b_1 = a/6[11\bar{2}]$, $b_2 = a/6[2\bar{1}\bar{1}]$ и винтовая система, для которой $b_1 = a/6[2\bar{1}\bar{1}]$, $b_2 = a/6[1\bar{2}1]$ (здесь a – параметр решетки).

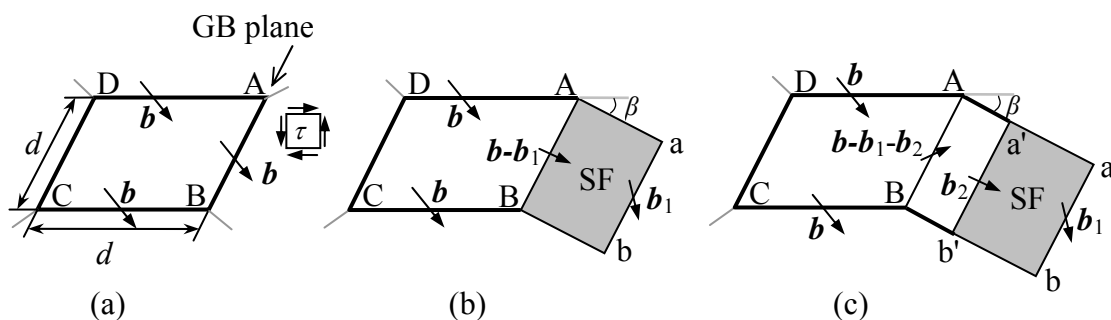


Рис. 6. Модель зарождения полупетель частичных дислокаций с векторами Бюргерса b_1 и b_2 на исходной петле решеточной дислокации с вектором Бюргерса b : (a) исходная петля, залегающая вдоль границы зерна; (b) зарождение первой полупетли частичной дислокации AabV на отрезке АВ исходной петли; (c) зарождение второй полупетли частичной дислокации Aa'b'V на отрезке АВ исходной петли.

Под действием приложенного напряжения τ петли частичных дислокаций расширяются путем скольжения сегментов ab и a'b'. Прочие сегменты дислокационных петель предполагаются неподвижными. Для анализа процесса испускания частичных дислокаций использовалась стандартная методика расчета изменения полной энергии системы в результате такого испускания. С помощью специально разработанного алгоритма была исследована как генерация петель частичных дислокаций, так и зависимость ширины дефектов упаковки от размера зерна и приложенного напряжения (рис. 7). Были найдены критические значения напряжений для генерации дислокаций и сделан вывод, что наиболее выгодным является зарождение дислокаций в системе скольжения 60° -I. Также было показано, что причиной аномально широких дефектов упаковки в нанокристаллическом Al являются высокие напряжения, а не напрямую малый размер зерна как было установлено в предшествующих моделях. С другой стороны, именно малый размер зерна делает возможным достижение высоких уровней напряжений через подавление дислокационной активности.

Третья глава посвящена теоретическому исследованию процессов пластической деформации, связанных с аккомодацией межзеренного скольжения. К таковым относятся механизмы деформации, в которых параллельно с межзеренным скольжением развивается другой деформационный процесс (или процессы), который приводит к трансформации структур дефектов, создаваемых межзеренным скольжением, в менее опасные с точки зрения внутренних упру-

гих полей напряжений, что облегчает протекание деформационных процессов и приводит к росту пластичности и вязкости разрушения материала.

В п. 3.1 предложена теоретическая модель, совместного действия трех механизмов деформации: собственно зернограничного скольжения, расщепления границ зерен и миграции границ зерен. Известно, что одновременно с пластическим течением за счет зернограничного скольжения и других механизмов, зачастую происходит деформационное измельчение зерен. Деформационная нанокристаллизация обычно описывается как процесс непрерывной эволюции ансамбля дислокационных дефектов с образованием ячеистых структур и высокоугловых границ. В материалах

под динамической нагрузкой при криогенных температурах измельчение зерен может осуществляться в процессе наномасштабной двойниковой деформации. Также некоторые эксперименты и компьютерное моделирование показали, что зарождение нанозерен может реализовываться в процессе расщепления и миграции границ зерен. Мы полагаем, что зернограничное скольжение и деформационное зарождение нанозерен (реализующиеся через расщепление и миграцию границ зерен) могут развиваться одновременно как кооперативный процесс, в котором дефекты, создаваемые зернограничным скольжением частично аккомодируются дефектами, возникающими при зарождении нанозерен. Эта гипотеза находит подтверждение в экспериментальных данных [Wu *et al*, *Acta Mater.* 53, 681 (2005); Miura *et al*, *Philos. Mag.* 85, 2653 (2005)] и в численном моделировании [Demkowicz *et al*, *Philos. Mag.* 87, 4253 (2007); Cao, Wei, *Phys. Rev. B* 76, 024113 (2007)] деформационного зарождения нано- и микроскопических зерен на границах зерен и тройных стыках в поли- и нанокристаллических твердых телах в процессе пластической деформации.

Для простоты рассматриваемый процесс совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна разделялся на две стадии. Под действием приложенного сдвигового напряжения τ на первой стадии происходит зернограничное скольжение, трансформирующее начальную конфигурацию I (рис. 8a) в конфигурацию II (рис. 8b), в которой стыки А и С являются нескомпенсированными на величины ω и $-\omega$ соответственно, где ω – есть угол разориентировки границы АВ, которая полагается симметричной границей наклона. В теории дефектов нескомпенсированность стыков А и С моделируется клиновыми дисклинациями (в данном случае диполем), мощность которых в точности равна угловой невязке $\pm\omega$ в этих точках. Плечо

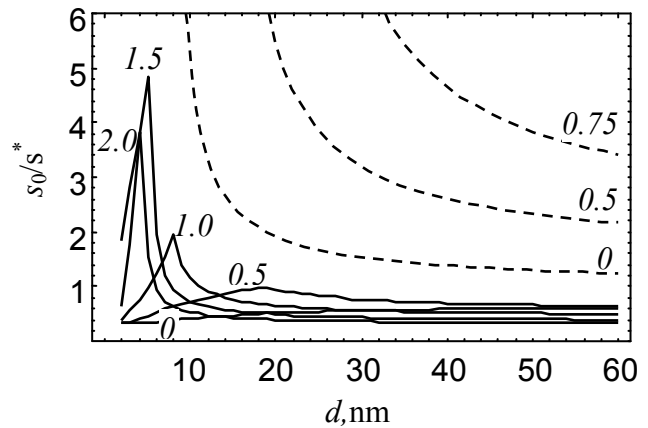


Рис. 7. Зависимости отношения равновесной ширины s_0 дефекта упаковки в нанозерне к его ширине s^* в бесконечной среде от размера зерна d при разных уровнях внешнего напряжения τ (показанных в единицах ГПа у соответствующих кривых) для системы скольжения 60° -I (сплошные линии) и модели [Zhu *et al*, *Appl. Phys. Lett.* 85, 5049 (2004)] (штриховые линии).

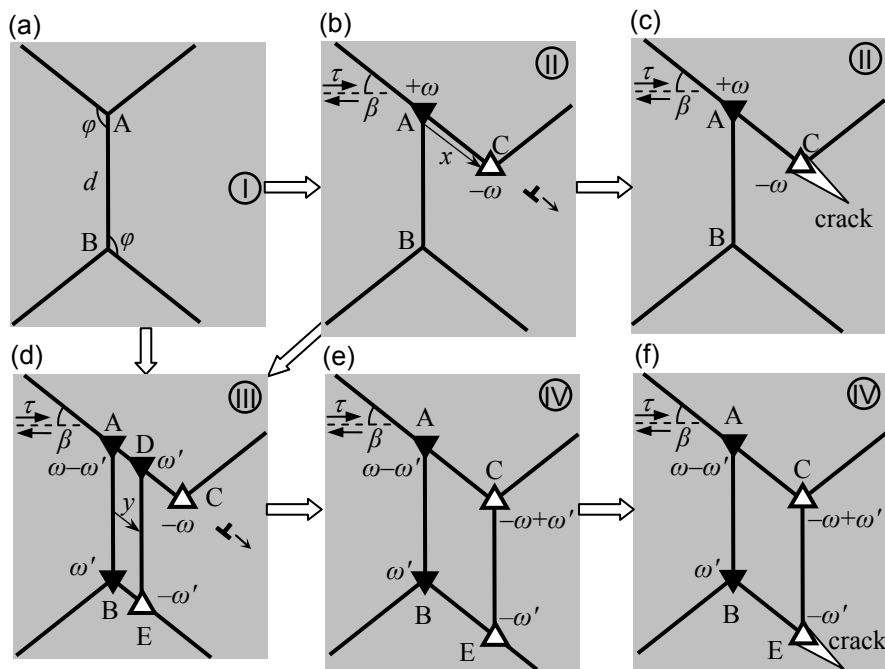


Рис. 8. Зернограничные деформационные процессы в нанокристаллическом образце. (a) Начальная конфигурация I границ зерен. (b) Конфигурация II, реализующаяся в результате «чистого» зернограничного скольжения, генерирующего диполь клиновых дисклинаций AC (показан треугольниками). (c) Трещина зарождается на дисклинационном диполе AC и растет в теле зерна. (d) Конфигурация III образуется в результате совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна. (e) При слиянии дисклинаций D и E формируется конфигурация IV, состоящая из двух дисклинационных диполей. (f) Трещина зарождается на диполе BE и растет вдоль границы зерна.

диполя AC равно величине x относительного смещения зерен (рис. 8b). Эта величина характеризует локальную пластическую деформацию вблизи рассматриваемого тройного стыка за счет зернограничного скольжения. Дисклинационный диполь AC в определенных условиях может стать очагом зарождения трещины (рис. 8c).

На второй стадии (рис. 8d) рассматриваемого процесса граница зерна AB расщепляется на два фрагмента: неподвижную границу (также обозначаемую AB) и подвижную границу DE, которые, для определенности полагаются симметричными границами наклона. Фрагмент DE под действием сдвигового напряжения τ мигрирует из исходного положения DE на расстояние y . Такие расщепление и миграция границы зерна приводят к следующим трансформациям дисклинаций: (1) дисклинация A, изначально имеющая мощность ω (рис. 8b) расщепляется на новую дисклинацию A с мощностью $\omega - \omega'$ и новую дисклинацию D с мощностью ω' (рис. 8d); (2) формируется еще один дисклинационный диполь BE с мощностью $\pm \omega'$ (рис. 8d). При этом мощность ω' равна углу разориентировки границы DE. Область ADEB представляет собой новое нанозерно, зарождение которого обусловлено миграцией границы DE (и соответствующим движением диполя DE), движение которой переносит пластическую деформацию. В предельном случае может сформироваться конфигурация IV (рис. 8e) в которой остаются только два дисклинационных диполя AC и BE в

результате слияния дисклинаций D и C. Помимо этого дисклинационные диполи, являющиеся мощными источниками механических напряжений, способны инициировать зарождение трещин, высвобождая часть упругой энергии, запасаемой этими диполями (рис. 8f).

Было рассчитано характеристическое изменение ΔW полной энергии системы при ее трансформации из начальной конфигурации I (рис. 8a) в конфигурацию III на рис. 8d, анализ которого показал, что процесс совместной реализации зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна энергетически предпочтительнее чистого зернограничного скольжения (без миграции). Была также численно оценена роль расщепления границы зерна, и найдены диапазоны параметров задачи (на примере нанокристаллического Ni), в которых доминируют либо совместные зернограничное скольжение и миграция границы зерна, либо зернограничное скольжение, расщепление и миграция (рис. 9).

С механизмами зернограничного скольжения и миграции границ зерен связана локальная пластическая деформация задаваемая следующим выражением:

$$\langle \varepsilon^* \rangle = (2/\pi) \int_0^{\pi/2} [(x_0 + 2y_0 \tan(\omega'/2))/d] d\beta, \quad (4)$$

где x_0 , y_0 определяются путем минимизации выражения (4) при заданных значениях τ , ω и ω' . На примере нанокристаллического Ni были найдены зависимости $\langle \varepsilon^* \rangle(\tau)$, а также, для сравнения, $\langle \varepsilon_{GBS} \rangle(\tau)$ и $\langle \varepsilon_{CGBSM} \rangle(\tau)$ для чистого зернограничного скольжения и механизма совместного зернограничного скольжения и миграции границы зерна (без расщепления), анализ которых с применением критерия Консидера показал, что условия для локализации пластического течения не выполняются ни для какого из упомянутых механизмов. Т.е. материал деформируется однородно при условии доминирования любого из обсуждаемых здесь механизмов.

Используя энергетический критерий зарождения и роста трещин на дисклинационном диполе было показано, что критическая деформация ε_c , при которой зарождается трещина существенно выше для механизма совместного

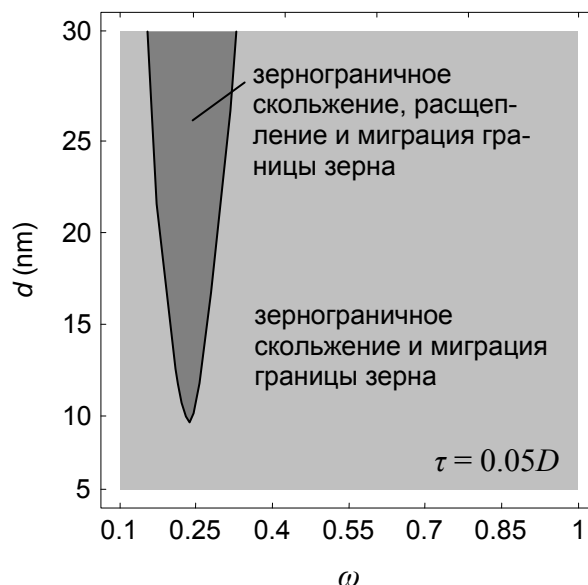


Рис. 9. График, показывающий рассчитанные для нанокристаллического Ni, деформируемого напряжением $\tau = 0.05D$, диапазоны параметров d (размер зерна) и ω (мощность дисклинаций на мигрирующей границе зерна), в которых доминируют либо зернограничное скольжение и миграция границы зерна, либо зернограничное скольжение, расщепление и миграция.

действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен, т.е. пластичность и трещиностойкость материала возрастает, если доминирует упомянутый совместный механизм по сравнению со случаями чистого зернограничного скольжения и совместного зернограничного скольжения и миграции границы зерна (без расщепления). В частности, на примере нанокристаллического Ni с размером зерна 50 нм для механизма чистого зернограничного скольжения (рис. 8b) мы нашли $\varepsilon_c \approx 0.13$ при $\omega = 0.5$ и $\varepsilon_c \approx 0.07$ при $\omega = 0.7$. Для механизма совместного действия зернограничного скольжения и миграции границы зерна $\varepsilon_c \approx 0.18$ при $\omega = 0.5$ и $\varepsilon_c \approx 0.12$ при $\omega = 0.7$. Наконец, для механизма совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границы зерна мы нашли $\varepsilon_c \approx 0.56$ при $\omega = 0.5$ и $\varepsilon_c \approx 0.26$ при $\omega = 0.7$. Эти оценки позволяют сделать вывод, что механизм совместного действия зернограничного скольжения, расщепления и миграции границ зерен обеспечивает больший рост пластичности и вязкости разрушения нанокристаллических и ультрамелкозернистых материалов по сравнению с механизмом совместного действия зернограничного скольжения и миграции границ зерен.

В п. 3.2 предложена теоретическая модель, описывающая влияние неаккомодированного и аккомодированного зернограничного скольжения (при низких и повышенных температурах соответственно) на рост трещин и, как следствие, трещиностойкость наноматериалов. Несмотря на то, что большинство наноматериалов имеют низкую пластичность и трещиностойкость, некоторые нанокристаллические металлы и керамики демонстрируют повышенную трещиностойкость в сравнении с поликристаллами. Например, Миршамс и др. [Mirshams *et al*, Mater. Sci. Eng. A 315, 21 (2001)] обнаружили, что сопротивление росту трещин в фольгах нанокристаллического Ni при комнатной температуре для неотожженных образцов и образцов, подвергавшихся отжигу при 373К, превосходит таковое для крупнозернистого поликристаллического Ni. Напротив, после отжига при 473К нанокристаллический Ni демонстрирует низкое сопротивление росту трещин по сравнению с крупнозернистым Ni. Повышение трещиностойкости может быть объяснено специфическими упрочняющими механизмами, оперирующими в этих наноматериалах (благодаря большому количеству границ зерен и наномасштабным эффектам) и способными "замещать" стандартное упрочнение посредством дислокационной эмиссии из вершин трещин.

Были предложены теоретические модели, описывающие такой упрочняющий механизм, а именно: уп-

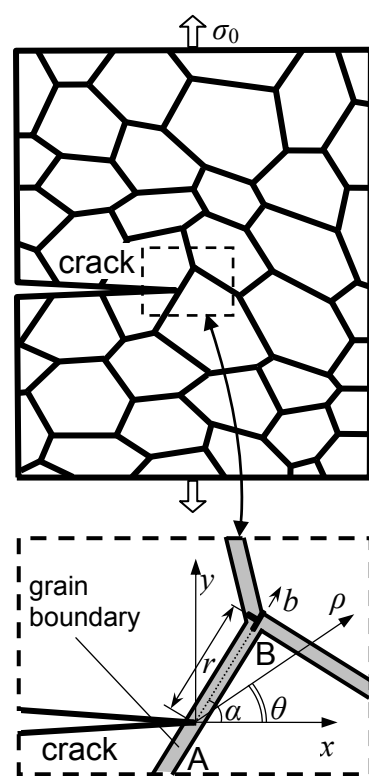


Рис. 10. Трещина в деформируемом нанокристаллическом образце. Выноска иллюстрирует генерацию краевой дислокации в тройном стыке границ зерен (или аморфных границ в керамике) вблизи вершины длинной трещины, пересекающей границу.

рочение посредством неаккомодированного и аккомодированного межзеренного скольжения в наноматериалах при низких и средних температурах соответственно. В рамках первой модели неаккомодированное межзеренное скольжение вблизи вершин трещин при сравнительно низких температурах приводит к созданию неподвижных некристаллографических дислокаций Вольтерра в тройных стыках границ зерен (рис. 10). Для нанокристаллических Al, Ni и 3C-SiC, используя силовой критерий роста трещин, было вычислено, что эффективный коэффициент интенсивности напряжений K_{IC}^* (трещиностойкость) возрастает на величину $\sim 30\%$ благодаря дислокации, создаваемой неаккомодированным межзеренным скольжением тройном стыке, если расстояние r_0 между дислокацией и вершиной трещины порядка 1 нм. Эффект значителен, однако увеличение K_{IC}^* стремительно спадает с увеличением r_0 в SiC. В нанокристаллических Al и Ni то же увеличение K_{IC}^* спадает более плавно с ростом r_0 . Чувствительность коэффициента интенсивности напряжений к расстоянию r_0 коррелирует с чувствительностью к размеру зерна d , поскольку вероятность обнаружить тройной стык вблизи вершины трещины тем больше, чем меньше размер зерна. А в наноматериалах с очень малым размером зерна, где трещины обычно растут вдоль границ зерен, r_0 фактически и будет размером зерна. С учетом вышесказанного, роль межзеренного скольжения как особого механизма упрочнения ярко выражена в нанокристаллических металлах и керамиках.

В случае более высоких температур межзеренное скольжение эффективно аккомодируется диффузионным переползанием зернограничных дислокаций и эмиссией решеточных дислокаций в тело зерна (рис. 11). Аккомодированное межзеренное скольжение может приводить к значительному затуплению вершин трещин, что, в свою очередь, значительно (от 1.1 до 3 раз в зависимости от температуры) повышает трещиностойкость (см. рис. 12). Этот эффект наиболее ярко выражен в наноматериалах с очень малым размером зерен и существенно ослабевает с ростом размера зерна d . То есть эффект аккомодированного межзеренного скольжения является специфическим

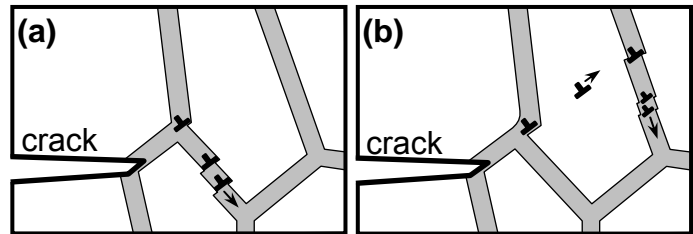


Рис. 11. Межзеренное скольжение, аккомодируемое путем (а) переползания зернограничных дислокаций, (б) эмиссии решеточных дислокаций из тройных стыков и последующего переползания зернограничных дислокаций.

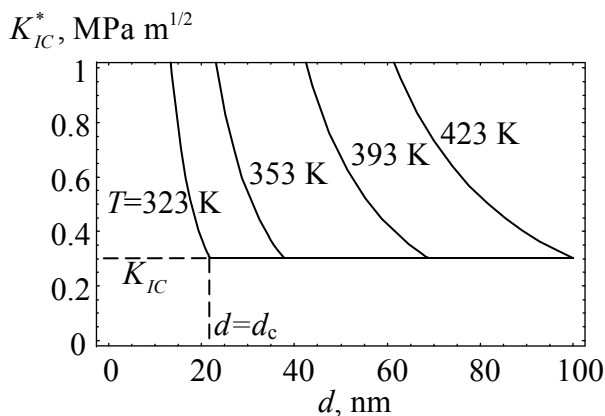


Рис. 12. Зависимость критического коэффициента интенсивности напряжений K_{IC}^* в нанокристаллическом Al от размера зерна d .

межзеренное скольжение может приводить к значительному затуплению вершин трещин, что, в свою очередь, значительно (от 1.1 до 3 раз в зависимости от температуры) повышает трещиностойкость (см. рис. 12). Этот эффект наиболее ярко выражен в наноматериалах с очень малым размером зерен и существенно ослабевает с ростом размера зерна d . То есть эффект аккомодированного межзеренного скольжения является специфическим

механизмом именно в нанокристаллических материалах и не актуален для крупнозернистых поликристаллов.

В п. 3.3 предложена теоретическая модель специального механизма перехода от пластического сдвига к ротационной деформации нанокристаллических материалах. Пластический сдвиг в таких материалах осуществляется путем зернограничного или дислокационного скольжения. Определенные структурные элементы могут служить препятствиями для пластического сдвига, что

приводит к образованию скоплений зернограничных или решеточных дислокаций вблизи этих элементов. Например, скопления зернограничных дислокаций в мезоскопических полосах сдвига формируются вблизи зерен, разделяющих сегменты полос сдвига. Дислокационные скопления создают поля напряжений инициирующие ротационную деформацию в этих зернах. Ротационная деформация осуществляется посредством скольжения и переползания зернограничных дислокаций, что приводит к локальным поворотам кристаллических решеток зерен. Все эти процессы были эффективно описаны через формирование неподвижных дисклинаций, расположенных в тройных стыках границ зерен и характеризующихся постепенно нарастающими мощностями (рис. 13). Через какое-то время система достигает состояния динамического равновесия, в котором упомянутые дисклинации, ответственные за локальные повороты кристаллической решетки, характеризуются равновесными значениями мощностей. Расчеты на примере Ni и $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ показали, что специальный механизм перехода от пластического сдвига к ротационной деформации энергетически выгоден. Были найдены типичные значения равновесной дисклинационной мощности ω_0 , величина которой варьируется в диапазоне от 3° до 7.5° в нанокристаллическом Ni при напряжении $\tau = 0.5$ ГПа, и от 4° до 11° в нанокристаллическом $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ при напряжении $\tau = 2$ ГПа.

Переход от пластического сдвига к ротационной деформации (рис. 13) представляет собой механизм аккомодации зернограничного скольжения, альтернативный стандартной эмиссии решеточных дислокаций из тройных стыков, трансформации их в зернограничные с последующим переползанием. Скорость этого специального механизма перехода контролируется сравнительно медленным переползанием зернограничных дислокаций, скорость которого, в свою очередь, контролируется зернограничной диффузией. Как следствие скорость описанного процесса перехода (рис. 13) идентична скорости обычной аккомодации, которая контролируется скоростью зернограничной диффузии.

В четвертой главе развиты теоретические модели процессов деформации, базирующиеся на концепции наномасштабного идеального пластического сдвига (нановозмущения), впервые предложенной в работе [Gutkin *et al*, *Acta Mater.* 54, 2489 (2006)] в связи с исследованием пластических свойств специальных титановых сплавов, называемых Гам-металлами (Gum Metal). Особен-

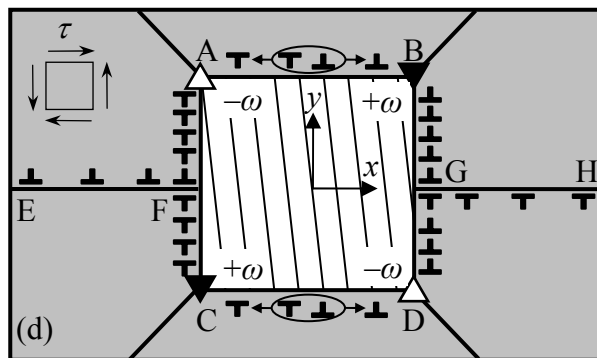


Рис. 13. Модель ротационной деформации, инициируемой зернограничным скольжением.

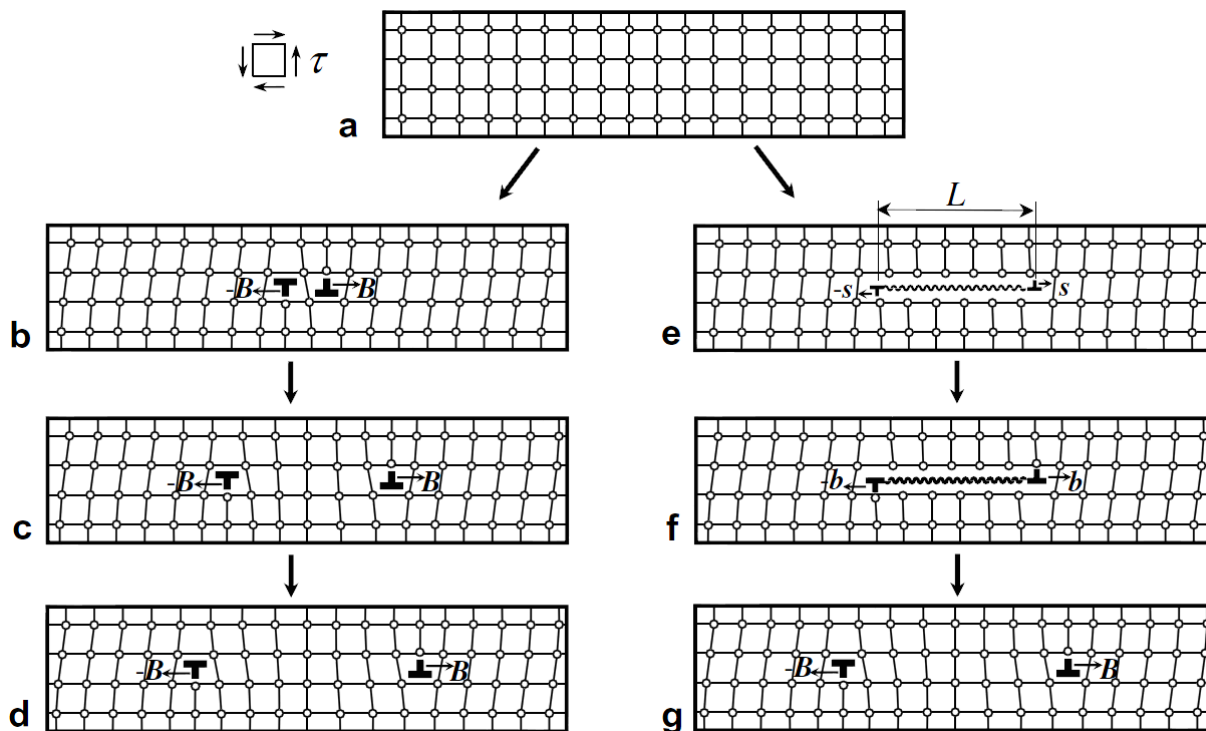


Рис. 14. (а)–(d) Иллюстрация стандартного гомогенного зарождения и движения диполя совершенных решеточных дислокаций. (е)–(g) Генерация того же диполя совершенных решеточных дислокаций посредством механизма наномасштабного идеального пластического сдвига (нановозмущение).

ностью деформированной микроструктуры этих сплавов является наличие возмущений кристаллической решетки в виде планарных дефектов, представляющих собой наноскопические области локализованного в отдельных атомных плоскостях сдвига, при видимом отсутствии подвижных решеточных дислокаций. Гуткин и др. развили теорию, согласно которой нановозмущения играют ключевую роль в деформации Гам-металлов как альтернативный источник подвижных дислокаций (в изначальном варианте диполей дислокаций).

Схема механизма представлена на рис. 14. На рис. 14а показан фрагмент кристаллической структуры материала, изначально свободный от дефектов. Серия рис. 14b–d иллюстрирует классическое гомогенное зарождение диполя совершенных решеточных дислокаций. В свою очередь серия рис. 14e–g демонстрирует механизм наномасштабного идеального пластического сдвига (нановозмущения), суть которого сводится к следующему. На определенном участке атомной плоскости длиной L происходит скоррелированный сдвиг небольшой величины s ($0 < s \leq B$, где B – величина вектора Бюргерса совершенной решеточной дислокации) (рис. 14e). При этом формируется дефектная структура, которая называется нановозмущением, представляющая собой диполь частичных некристаллографических дислокаций, ограничивающих область сдвига (фактически это дислокации в смысле Вольтерра, как они понимаются в континуальной теории упругости) и разделенных так называемым обобщенным дефектом упаковки. В теории кристаллов обобщенный дефект упаковки определяется как плоский дефект, образование которого может быть представлено как процесс, при котором идеальный кристалл разрезается вдоль некоторой атомной плоскости на две части, части сдвигаются друг относительно-

но друга на произвольный вектор s , лежащий в плоскости разреза, и объединяются вновь. Стандартный дефект упаковки является частным случаем (стабильной конфигурацией) обобщенного, который реализуется при определенном (задаваемом кристаллографией материала) значении сдвига s . В дальнейшем сдвиг s нарастает и может достигать величины частичного вектора Бюргерса b (рис. 14f), при котором некристаллографические дислокации трансформируются в решеточные частичные дислокации, а обобщенный дефект упаковки – в стандартный. В финале, когда s достигает величины решеточного вектора Бюргерса B , дислокации трансформируются в совершенные, а обобщенный дефект упаковки исчезает. При этом формируется структура полностью идентичная гомогенному зарождению решеточных дислокаций (рис. 14d).

В п 4.1 предложена модель нового физического механизма пластического течения в нанопроволоках, связанного с образованием и эволюцией приповерхностных областей наномасштабного идеального пластического сдвига (нановозмущений). Был теоретически описан новый режим пластической деформации посредством зарождения и роста нановозмущений в бездефектных ГЦК нанопроволоках с учетом роли углов (граней) в инициации пластического сдвига. Также теоретически описана роль нановозмущений, формирующихся последовательно в соседних атомных плоскостях, как зародышей деформационных двойников. Деформационное зарождение изолированных дефектов упаковки в нанопроволоках экстремально малого размера без помощи классических дислокаций впервые было теоретически предсказано в работе [Bobylev, Ovid'ko, Phys. Rev. Lett. 103, 135501 (2009)]. Это предсказание поддержано экспериментальными наблюдениями [Kurui *et al*, Phys. Rev. B 79, 165414 (2009); Lagos *et al*, Phys. Rev. Lett. 106, 055501 (2011)] изолированных дефектов упаковки в золотых нанопроволоках с поперечными размерами 5 нм и менее.

Геометрические особенности нового механизма проиллюстрированы на трехмерном виде фрагмента нанопроволоки, находящейся под действием растягивающего напряжения (рис. 15а–е), и на двухмерном виде сечения $KLMN$ (рис. 15а) нанопроволоки, показанном на рис. 15f–j. В ГЦК нанопроволоках сдвиг, а следовательно и зарождение нановозмущений), осуществляется в плоскости типа $\{111\}$. На начальном этапе приложенное напряжение вызывает мгновенный идеальный сдвиг, характеризующийся малой величиной s , в фрагменте ABC плоскости скольжения. Этот сдвиг приводит к формированию обобщенного дефекта упаковки ABC наноскопического размера (рис. 15b,g). Внутри нанопроволоки обобщенный дефект упаковки ограничен некристаллографической частичной дислокацией BC с вектором Бюргерса s (рис. 15b,g), модуль которого мал ($s < b$, где b – вектор Бюргерса обычной кристаллографической частичной дислокации). Всю эту совокупность дефектов мы называем нановозмущением. На следующем этапе деформации величина s непрерывно возрастает (рис. 15c,h). Параллельно некристаллографическая дислокация может двигаться. Когда величина s сравнивается с b нановозмущение трансформируется в обычную частичную дислокацию, соединенную стабильным дефектом упаковки (обобщенный дефект упаковки в состоянии с минимальной энергией) ABC со свободной поверхностью (рис. 15d,i). Затем частичная дислокация двигается к свободной поверхности, где она исчезает, оставляя после себя стабильный дефект упаковки (рис. 15e,f).

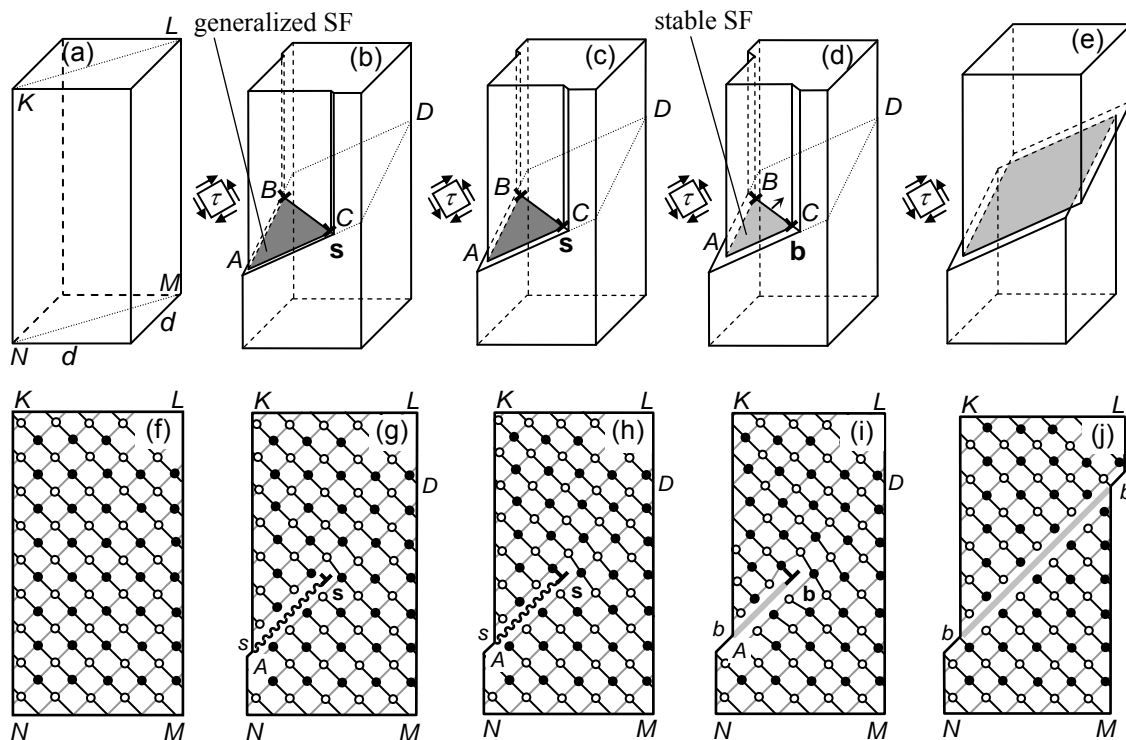


Рис. 15. Пластическая деформация нанопроволоки. (a)–(j) Режим деформации путем зарождения и роста нановозмущений (трехмерный вид). (f)–(j) Двухмерный вид деформационного режима с нановозмущениями в кристаллографической плоскости (содержащей линию скольжения AD) нанопроволоки.

Были рассчитаны энергетические характеристики как нового так и обычного режимов пластической деформации в нанопроволоках на примере модельной конфигурации, показанной на рис. 15. Результаты расчетов энергетических характеристик показывают, что режим деформации через нановозмущения доминирует над стандартным механизмом зарождения и скольжения дислокаций в идеальных золотых (Au) нанопроволоках в приближении нулевой температуры. В тоже время в неидеальных нанопроволоках со ступеньками на свободной поверхности классический режим деформации наоборот энергетически предпочтительнее режима нановозмущений. Также была теоретически исследована роль нановозмущений в генерации наномасштабных деформационных двойников в деформируемых ГЦК нанопроволоках. Было показано, что под действием высоких механических напряжений в нанопроволоках возможно безбарьерное образование таких двойников посредством генерации нановозмущений. Расчеты показали, что образование наномасштабных двойников энергетически предпочтительнее формирования изолированных нановозмущений и стабильных дефектов упаковки. Критическое напряжение τ_c (минимального напряжения, при котором деформация осуществляется безбарьерным путем), характеризующее зарождение двойников ниже (приблизительно на 15%) по сравнению с таковым для изолированных дефектов упаковки в Au и Cu нанопроволоках (рис. 16). Критическое напряжение τ_c чувствительно к поперечному размеру нанопроволоки d . В диапазоне размеров от d от 1 до 300 нм зависимости $\tau_c(d)$ демонстрируют типичный размерный эффект (чем меньше – тем прочнее). Для ультратонких нанопроволок значения τ_c исключительно велики: при $d = 10$ нм $\tau_c \approx 0.1G$ в Au и $\approx 0.08G$ в Cu.

В п 4.2 предложена модель испускания решеточных и зерно-границных дислокаций порами в нанокристаллических материалах путем наноскопического идеального сдвига. Известно, что пластичность, являющаяся чрезвычайно важной характеристикой нанокристаллических материалов, существенным образом зависит от поведения пор в таких материалах при механической нагрузке. Растягивающие напряжения в кристаллах стимулируют рост пор, скорость которого обычно контролируется диффузионным массопереносом особенно в случае высоких температур. Возможен рост пор и за счет испускания ими дислокаций [Lubarda *et al*, Acta Mater. 52, 1397 (2004)]. Однако теоретическое описание такого процесса посредством обычного механизма испускания дислокаций порами (посредством зарождения дислокаций на свободной поверхности поры и ее последующего скольжения в кристалле) показывает, что для многих материалов при квазистатическом нагружении требуется преодоление значительного энергетического барьера. Поэтому действие такого механизма является эффективным только в кристаллах при высокоскоростном (ударном) нагружении, при котором действуют предельно высокие касательные напряжения. В настоящей работе предлагается новый механизм испускания решеточных и зернограницных дислокаций порами в наноматериалах, основывающийся на представлениях о наноскопическом идеальном пластическом сдвиге, реализующемся при высоких касательных напряжениях и характеризующийся отсутствием энергетического барьера.

Действие нового механизма иллюстрируется рисунком 17. Более подробно, в начальный момент времени под действием приложенного внешнего напряжения в ближайшей окрестности поры (в области концентрации напряжений) происходит идеальный наноскопический сдвиг кристаллической решетки (рис. 17b). Величина b этого сдвига предполагается малой. В данном случае обобщенный дефект упаковки ограничен с одной стороны порой, а с другой дислокацией с некристаллографическим вектором Бюргеса \mathbf{b} , который изначально характеризуется очень малой величиной (модулем, много меньшим модуля b_L вектора Бюргера решеточной дислокации). На следующем этапе модуль b

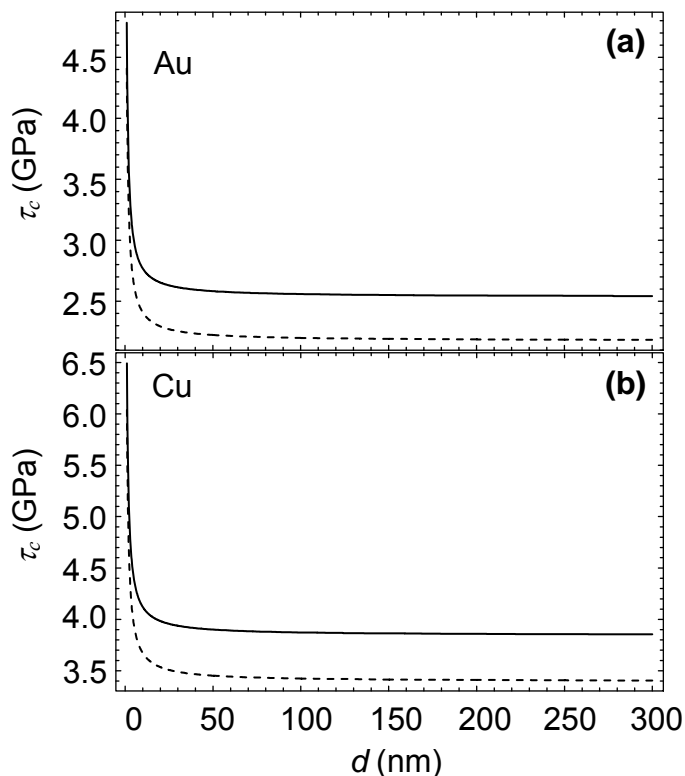


Рис. 16. Зависимости критического напряжения τ_c (минимального напряжения, при котором деформация осуществляется безбарьерным путем) от размера d в (a) золотых (b) медных нанопроволоках. Сплошные кривые соответствуют образованию изолированных нановозмущений, пунктирные кривые соответствуют формированию наномасштабных зародышей двойников.

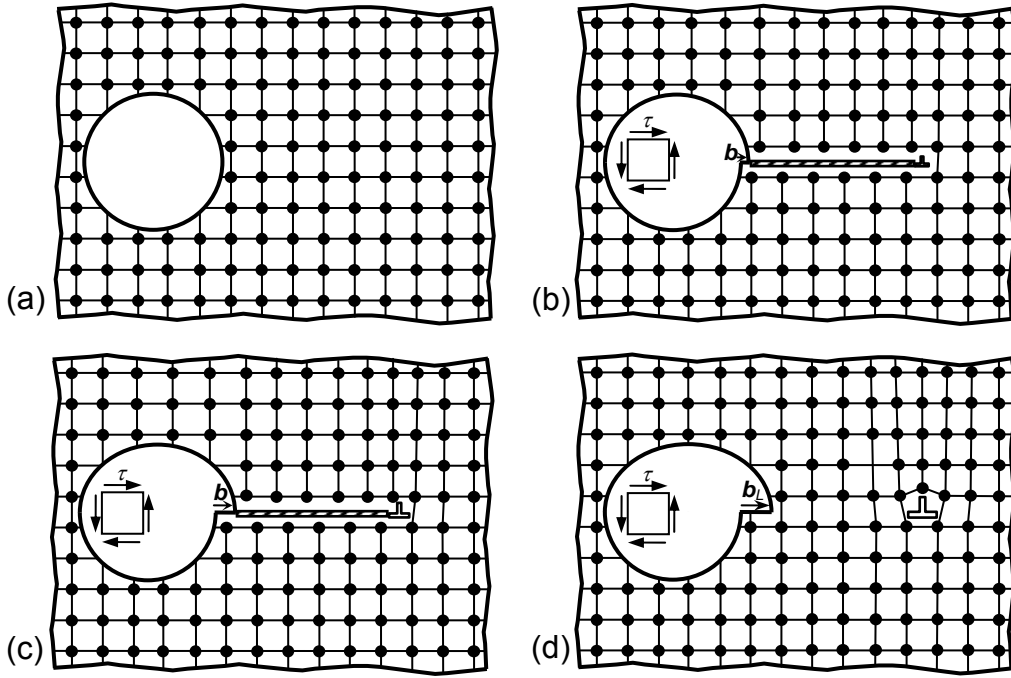


Рис. 17. Новый механизм эмиссии решеточной дислокации из поры в твердом теле.

вектора Бюргера непрерывно возрастает (рис. 17c) до величины модуля b_L (рис. 17d) вектора Бюргера решеточной дислокации. В этот момент дефект упаковки, который эволюционирует вместе с возрастанием вектора Бюргера b , исчезает; на его месте восстанавливается идеальная кристаллическая структура. В финале реализуется конфигурация (рис. 17d), в которой существует только решеточная дислокация, т.е. конфигурация, полностью идентичная случаю стандартного механизма испускания дислокации.

Были исследованы энергетические характеристики решеточных и зернограничных дислокаций из поры в предположении, что пора имеет цилиндрическую форму, характеризуется вектором Бюргера B и может испускать решеточные или зернограничные дислокации под действием внешнего касательного напряжения τ . Изменение энергии ΔW системы в результате зарождения дислокации с вектором Бюргера b на расстоянии d от поры было найдено в виде:

$$\Delta W = \frac{Db^2}{2} \left\{ \ln \frac{R_0}{r_0} + \ln(\tilde{d}^2 - 1) \right\} + \frac{Db^2}{2} \left\{ 1 - \frac{B}{b} \left(2 \ln \tilde{d} + \frac{1}{\tilde{d}^2} \right) \right\} - \frac{Db^2}{2} \left\{ \frac{2\tau R_0}{Db} \left(\tilde{d} - \frac{2}{\tilde{d}} + \frac{1}{\tilde{d}^3} \right) \right\} + W_\gamma. \quad (5)$$

Здесь R_0 – радиус поры, r_0 – радиус обрезания дислокации b , $\tilde{d} = d/R_0$, W_γ – энергия обобщенного дефекта упаковки (разная для случаев испускания решеточных и зернограничных дислокаций). Анализ ΔW на примере ГЦК металлов Ni, Cu и Al позволил установить, что для испускания дислокации из поры в общем случае система должна преодолеть определенный энергетический барьер. Были найдены зависимости высоты энергетического барьера от

длины обобщенного дефекта упаковки и установлено, что при определенной длине барьер может обращаться в ноль. Показано, что испускание дислокаций из пор в Ni, Cu и Al энергетически выгодно при реалистичных значениях приложенного напряжения. Испускание зернограничных дислокаций при прочих равных условиях осуществляется значительно легче по сравнению с решеточными дислокациями. Это обуславливает значительное влияние исследуемого процесса в условиях, когда зернограничное скольжение вносит существенный вклад в пластическую деформацию.

В пятой главе представлены теоретические модели, описывающие разнообразные структурные трансформации границ зерен в высокотемпературных сверхпроводниках, движущей силой которых является релаксация избыточной упругой энергии дефектных структур.

В п. 5.1 предложена теоретическая модель трансформации малоугловой границы наклона в бикристаллической сверхпроводящей пленке под действием напряжений несоответствия. Обычно малоугловые границы зерна упрощенно представляют в виде стенок равномерно упорядоченных краевых дислокаций – стенок с постоянным углом разориентировки. Однако в реальных материалах границы могут претерпевать разнообразные трансформации. Так, интуитивно понятно и показано экспериментально, что присутствие напряжений несоответствия и свободной поверхности в пленке делают конфигурацию с равномерным упорядочением дислокаций не самой энергетически выгодной (известно, что дислокации притягиваются к свободной поверхности, т.е. в отсутствии напряжений несоответствия должно наблюдаться сгущение дислокаций вблизи поверхности). Представляется достаточно очевидным, что дислокационная плотность должна перераспределяться некоторым образом (можно сказать, что угол разориентировки меняется вдоль границы) в результате чего общая энергия системы будет понижаться (релаксировать). Подобная трансформация должна оказывать влияние на сверхпроводящие свойства (поскольку меняется угол разориентировки), поэтому представляет практический интерес построение модели малоугловой границы в упруго напряженной пленке. Была построена модель, описывающая трансформацию малоугловой границы наклона в бикристаллической сверхпроводящей пленке на полубесконечной подложке в присутствии напряжений несоответствия от межфазной границы.

Рассматривалась система пленка/подложка, состоящая из бикристаллической пленки толщины H и полубесконечной подложки. Пленка и подложка предполагались изотропными средами, имеющими одинаковый модуль сдвига G и коэффициент Пуассона ν . Граница пленка/подложка характеризовалась параметром несоответствия: $f = 2(a_f - a_s)/(a_f + a_s)$, где a_s и a_f параметры решеток подложки и пленки, соответственно. Граница раздела пленка/подложка создает напряжения несоответствия, благодаря несоответствию (геометрическому) соседствующих кристаллических решеток пленки и подложки. Эти напряжения воздействуют на зернограничные дислокации, заставляя их двигаться либо к свободной поверхности (где дислокации исчезают), либо к границе пленка/подложка, в результате чего новая дислокационная конфигурация способствует аккомодации напряжений несоответствия. В настоящей работе рассматривались пространственно неоднородные распределения дислокаций в

границах зерен в пленках, вызываемых напряжениями несоответствия. Мы смоделировали, в первом приближении, границу наклона (перпендикулярную границе пленка/подложка) в пленке, состоящей из N ($N > 1$) фрагментов, каждый из которых характеризуется плотностью ρ_i зернограницных дислокаций, где $i = 1, \dots, N$ (см. рис. 18). Плотность дислокаций ρ_i i -го фрагмента границы зерна напрямую связана с разориентацией фрагмента. Следовательно, разные фрагменты границы зерна характеризуются разными значениями θ_i разориентации. Пересечения таких фрагментов границы представляют линейные ядра зернограницных дисклинаций, ротационных дефектов. В результате, дисклинация в пересечении фрагментов с разориентациями θ_i и θ_{i+1} , соответственно, является клиновой дисклинацией с мощностью $\omega_i = \theta_{i+1} - \theta_i$.

Таким образом, в рамках нашей модели, структурная трансформация границы зерна наклона, вызываемая напряжениями несоответствия в бикристаллической пленке, описывалась как пространственно неоднородное изменение плотности зернограницных дислокаций. Описываемая трансформация приводит к образованию N ($N > 1$) фрагментов границ, разделенных N зернограницными дисклинациями (рис. 18). Для простоты фрагменты границы предполагались одинаковой длины H/N ; в этом случае зернограницные дисклинации оказываются упорядоченными периодически. В системе, изображенной на рис. 18 мощности ω_i клиновых дисклинаций являются неизвестными величинами. Для их определения было рассчитано изменение упругой энергии ΔW , сопровождающее обсуждаемую трансформацию:

$$\Delta W = \frac{DH^2}{2N^2} \left\{ \sum_{i=1}^N \left[\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left(ik + \frac{(i-k)^2}{2} \ln \left| \frac{i-k}{i+k} \right| \right) \omega_i \omega_k + i^2 \omega_i^2 \right] - 4\pi(1+\nu)f \sum_{i=1}^N i^2 \omega_i \right\}. \quad (6)$$

Равновесные значения ω_i определялись из условия глобального минимума для ΔW : $\partial(\Delta W)/\partial\omega_j = 0$, где $j = 1, 2, \dots, N$, которое приводит к линейной системе уравнений:

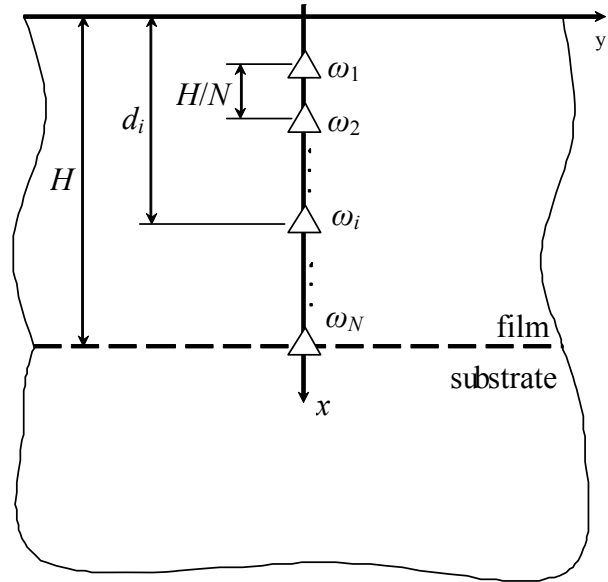


Рис. 18. Граница наклона в тонкой пленке, состоящая из N фрагментов с разориентациями θ_i ($i = 1, \dots, N$). Клиновые дисклинации (треугольники) в стыках фрагментов с разными разориентациями.

$$2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left[jk + \frac{(j-k)^2}{2} \ln \left| \frac{j-k}{j+k} \right| \right] \alpha_k + 2j^2 \alpha_j = j^2, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (7)$$

где $\alpha_k = \omega_k / [4\pi(1 + \nu)f]$. Значения α_k связаны с углами разориентации θ_i , характеризующими фрагменты границы наклона (рис. 18): $\theta_i = \theta' + \Delta\theta_i$, где, $\Delta\theta_i = 4\pi(1 + \nu)f \sum_{k=i}^N \alpha_k$, а θ' – разориентация границы наклона в ее начальном состоянии (при равномерном распределении дислокаций). Анализ результатов показал, что в зависимости от знака несоответствия наблюдается сгущение дислокационной плотности либо вблизи межфазной границы, либо у свободной поверхности.

Также была сделана оценка изменения критического сверхпроводящего тока через границу в результате описанной трансформации. Использовалась известная феноменологическая зависимость критического тока J_c от угла разориентировки: $J_c = J_0 \exp(-\theta / \theta_0)$ (J_0 и θ_0 – константы). Оказалось, что возможно как уменьшение, так и увеличение критического тока в результате трансформации границы (рис. 19). В случае положительного несоответствия ток уменьшается, в случае отрицательного – значительно возрастает, что соответствует экспериментальным данным.

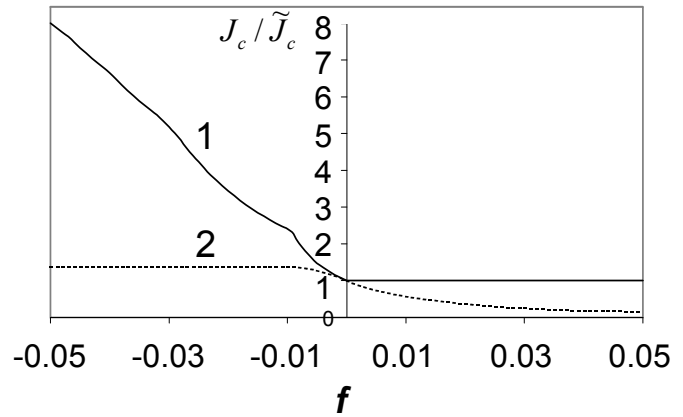


Рис. 19. Зависимость отношения от J_c / \tilde{J}_c от параметра несоответствия f для границы наклона с начальной разориентацией $\theta' = 3^\circ$ (кривая 1) и $\theta' = 15^\circ$ (кривая 2).

В п. 5.2 теоретически описано формирование нанозерен с 90° границами наклона в пленках типа YBaCuO. В рамках предложенной модели формирование нанозерен выступает как новый механизм релаксации напряжений несоответствия. Релаксация напряжений несоответствия является мощной движущей силой, способной вызвать не только перестройку существующей границы, но и образование новых структур. Так, в экспериментах [Zhai *et al*, Philos. Mag. Lett. 81, 683 (2001)] в напряженных эпитаксиальных пленках YBaCuO наблюдалось образование областей с локальной переориентацией решетки на 90° (нанозерен с 90° границами наклона). Более точно, в эксперименте исследовались YBaCuO пленки с кристаллографической осью c (направление [001]), перпендикулярной границе пленка/подложка. Кристаллическая решетка нанозерен повернута на 90° вокруг оси a или b , т.е. направления [100] или [010] нанозерен ориентированы перпендикулярно свободной поверхности (рис. 20). Нанозерна шириной ~ 10 нм образуются на расстоянии ~ 30 – 45 атомных слоев от границы пленка/подложка и обычно простираются до свободной поверхности. Границы между нанозерном и матрицей пленки могут быть источниками напряжений, которые способны частично компенсировать напряжения несоответствия. Была

предложена теоретическая модель, в рамках которой образование таких нанозерен, повернутых на 90° относительно решетки пленки, трактуется как механизм релаксации упругих напряжений несоответствия, генерируемых межфазной границей.

Рассматривалась модельная система, состоящая из тонкой пленки на полубесконечной подложке, упругие модули которых предполагались идентичными. Межфазная граница пленка/подложка характеризуется геометрическим несоответствием между параметрами решеток пленки и подложки. Так как кристаллическая решетка YBaCuO является ортогональной (некубической), то на границах нанозерен возникает геометрическое несоответствие, подобное несоответствию на межфазной границе пленка/подложка. Т.е. 90° границы нанозерен сами являются источниками напряжений несоответствия. Если предположить, что границы нанозерен являются когерентными, то можно их описывать известным способом как ряды непрерывно распределенных краевых дислокаций (называемых когерентными) с бесконечно малым вектором Бюргерса db_c , плотность ρ_c которых связана с параметром несоответствия f_1 соотношением вида: $\rho_c db_c = f_1$ (рис. 20). Однако, анализ геометрии системы нанозерно / пленка / подложка показал, что в случае когерентного соответствия на нижней границе нанозерна релаксация напряжений несоответствия невозможна. Поэтому в рамках модели нижняя граница считалась некогерентной, что моделировалось зарождением на ней делокализованной дислокации несоответствия с суммарным вектором Бюргерса \mathbf{B}_m . Таким образом, в рамках предложенной модели поле напряжений, создаваемых границами нанозерна, складывается из полей напряжений дислокаций (когерентных и несоответствия), располагающихся на них. Эти поля упругих напряжений были рассчитаны с учетом присутствия свободной поверхности. Затем был совершен переход к случаю периодической системы идентичных нанозерен в пленке, характеризуемой периодом упорядочения D , и рассчитаны поля напряжений такой системы. Оценка выгодности зарождения нанозерен проводилась на базе энергетического критерия: $\Delta W = W_d - W_0 < 0$, где W_d – энергия пленки, содержащей нанозерна, состоящая из упругой энергии W_d^{el} и поверхностной энергии $W_\gamma = 2L\gamma$, характеризующей некогерентные границы нанозерен, W_0 – энергия пленки без нанозерен. Для того чтобы вычислить упругую энергию W_d^{el} пленки с нанозернами использовалось классическое выражение для плотности упругой энергии (на единицу объема):

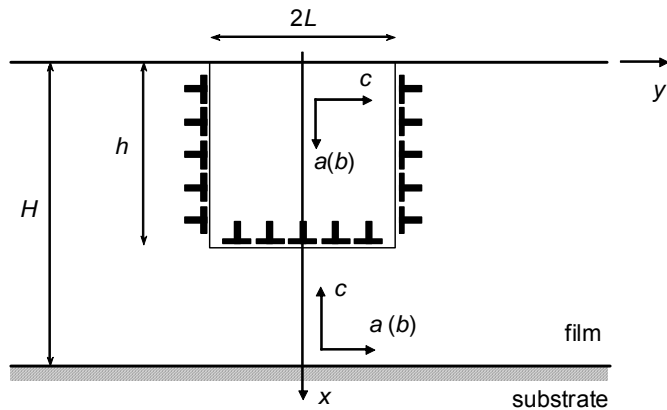


Рис. 20. Боковые и нижние 90° границы наклона нанозерна, представляемые в виде ансамблей непрерывно распределенных когерентных дислокаций, в случае когерентного соответствия кристаллических решеток нанозерна и матрицы пленки.

Если предположить, что границы нанозерен являются когерентными, то можно их описывать известным способом как ряды непрерывно распределенных краевых дислокаций (называемых когерентными) с бесконечно малым вектором Бюргерса db_c , плотность ρ_c которых связана с параметром несоответствия f_1 соотношением вида: $\rho_c db_c = f_1$ (рис. 20). Однако, анализ геометрии системы нанозерно / пленка / подложка показал, что в случае когерентного соответствия на нижней границе нанозерна релаксация напряжений несоответствия невозможна. Поэтому в рамках модели нижняя граница считалась некогерентной, что моделировалось зарождением на ней делокализованной дислокации несоответствия с суммарным вектором Бюргерса \mathbf{B}_m . Таким образом, в рамках предложенной модели поле напряжений, создаваемых границами нанозерна, складывается из полей напряжений дислокаций (когерентных и несоответствия), располагающихся на них. Эти поля упругих напряжений были рассчитаны с учетом присутствия свободной поверхности. Затем был совершен переход к случаю периодической системы идентичных нанозерен в пленке, характеризуемой периодом упорядочения D , и рассчитаны поля напряжений такой системы. Оценка выгодности зарождения нанозерен проводилась на базе энергетического критерия: $\Delta W = W_d - W_0 < 0$, где W_d – энергия пленки, содержащей нанозерна, состоящая из упругой энергии W_d^{el} и поверхностной энергии $W_\gamma = 2L\gamma$, характеризующей некогерентные границы нанозерен, W_0 – энергия пленки без нанозерен. Для того чтобы вычислить упругую энергию W_d^{el} пленки с нанозернами использовалось классическое выражение для плотности упругой энергии (на единицу объема):

$$w = \frac{1}{2E}(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2 + \sigma_{zz}^2) - \frac{\nu}{E}(\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{yy}\sigma_{zz} + \sigma_{xx}\sigma_{zz}) + \frac{1}{2G}(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2), \quad (8)$$

где σ_{ij} – компоненты тензора упругих напряжений, рассчитанных для системы нанозерен, E и G – модули Юнга и сдвига материала соответственно, ν – коэффициент Пуассона. В пленке без нанозерен существуют только однородные напряжения несоответствия, и плотность упругой энергии (на единицу объема) w_0 в этом случае задается известным выражением:

$$w_0 = \frac{G}{1-\nu}(f_a^2 + f_b^2 + 2\nu f_a f_b). \quad (9)$$

где f_a и f_b – параметры несоответствия, характеризующие межфазную границу (несоответствие двумерное, т.к. решетка пленки некубическая). Полное изменение энергии (в расчете на один период D упорядочения системы нанозерен) из найденных плотностей находится интегрированием по объему пленки и подложки, найденных плотностей:

$$\Delta W = \int_{-D/2}^{D/2} dy \int_0^{\infty} dx (w - w_0) + W_\gamma. \quad (10)$$

Анализ получившихся зависимостей на примере пленки типа $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ с параметрами решетки $a = 0.3824$ нм, $b = 0.3886$ нм, $c = 1.168$ нм, $G = 55$ ГПа, $\nu = 0.26$, $\gamma \approx 0.6$ Дж/м² приводит к следующим ключевым выводам: формирование нанозерен энергетически выгодно при определенных значениях параметров системы; энергетически выгодно формирование достаточно узких нанозерен с шириной $2L \sim (30-40)b$; для $H = 100b$ оптимальный период упорядочения $D \approx 5.9L$, что дает долю поверхности пленки, занятую нанозернами, приблизительно 34%; для более толстых пленок энергетически выгодно слияние нанозерен с образованием единого разгруженного слоя. Указанные факты находят полное подтверждение в эксперименте [Zhai *et al*, Philos. Mag. Lett. 81, 683 (2001)].

В п. 5.3 предложена модель расщепления дислокаций в фасетированных малоугловых границах зерен в упругонапряженных высокотемпературных сверхпроводниках. Еще в ранних экспериментальных работах было отмечено, что ВТСП типа YBaCuO и некоторым другим присуща фасетированная структура границы зерна, т.е. плоская на макроскопическом уровне граница, на микроскопическом уровне оказывается образованной из чередующихся сегментов разной кристаллографической ориентации. Более того, в работе [Tsu *et al.*, J. Mater. Res. 11, 1383 (1996)] было показано, что дислокации в таких фасетированных малоугловых границах как правило расщеплены. Причем расщепление имеет следующую особенность: дислокации сильно расщепляются (с образованием протяженного дефекта упаковки) в центральных областях фасеток и слабо, или вообще не расщеплены, вблизи стыков фасеток (рис. 21). Подобная структурная трансформация, очевидно, должна оказывать влияние на протекание сверхпроводящего тока через границу (увеличивается число дислокаций,

изменяются поля напряжений). Учитывая, что описанная трансформация является типичной для ВТСП, представляется важным ее теоретическое описание.

В данном разделе были обсуждены геометрические особенности фасетированных структур малоугловых границ зерен и их влияние на дислокационные конфигурации на примере малоугловых границ в высокотемпературных сверхпроводниках типа $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Очевидно, что дислокации, расположенные вблизи стыков и в центральных областях фасеток находятся в разных условиях с точки зрения окружающих их дислокаций (рис. 21). Следовательно, упругие поля напряжений соседних дислокаций создают разные условия для расщепления, которое обуславливается общим выигрышем в упругой энергии системы. Анализ выгодности образования расщепленных дислокационных

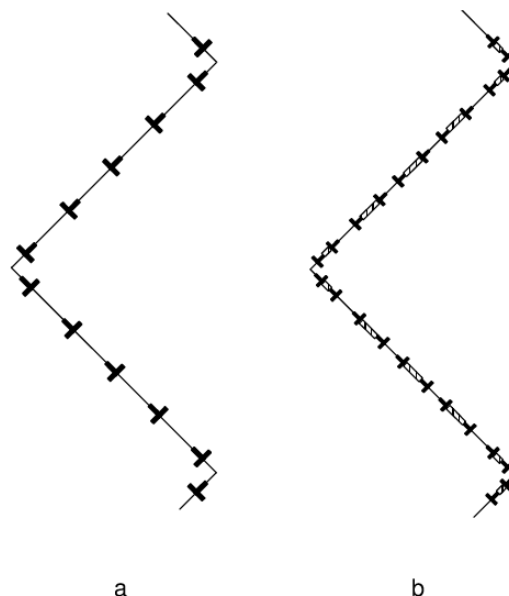


Рис. 21. Структура фасетированной границы наклона в высокотемпературном сверхпроводнике: (а) обычная, (б) расщепленная.

конфигураций был проведен отдельно для центральных областей фасеток и областей вблизи стыка фасеток на основании энергетического критерия путем сравнения энергий расщепленной и нерасщепленной конфигураций. В обоих случаях рассматривался упрощенный случай, когда расщепляется только одна дислокация границы. Результаты расчетов изменения энергии ΔW_{1-2} в зависимости от расстояния расщепления дислокаций представлены на рис. 22 для случаев расщепления дислокации вблизи стыка фасеток и в центре фасетки (кривые 1 и 2, соответственно). Видно, что кривая 2 имеет выраженный локальный минимум, который определяет равновесное расстояние расщепления. Кривая 1, в свою очередь, монотонно убывает

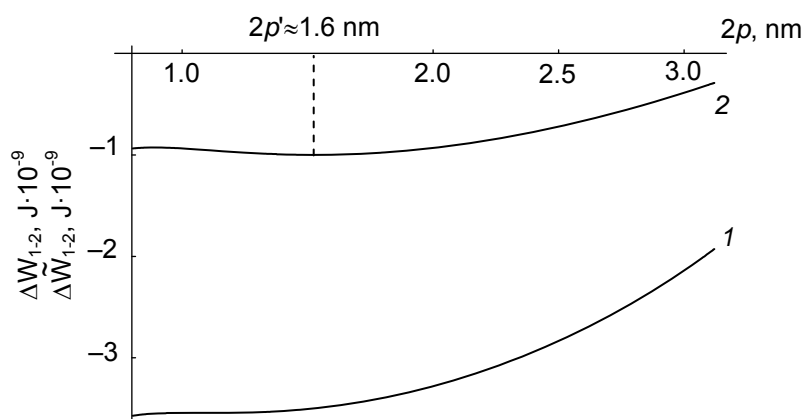


Рис. 22. Зависимости характеристических разностей энергий (ΔW_{1-2} и $\Delta \tilde{W}_{1-2}$) от расстояния $2p$ между частичными дислокациями в расщепленной конфигурации вблизи стыка фасеток (кривая 1) и в центральной части фасетки (кривая 2).

с уменьшением p , следовательно, в случае расщепления вблизи стыка фасеток, наиболее выгодна расщепленная дислокационная конфигурация с минимальным расстоянием между частичными дислокациями. Результаты, полученные в рамках нашей модели, находятся в согласии с экспериментальными данными [Tsu *et al.*, J. Mater. Res. 11, 1383 (1996)], согласно которым расщепление в фасетированных границах зерен в

высокотемпературных сверхпроводниках типа YBaCuO сильно в центрах фасеток и слабо вблизи стыков.

Также была проведена оценка изменения критического тока через малоугловую границу, все дислокации которой расщеплены, и сделан вывод, что ток в общем случае возрастает. В зависимости от угла разориентировки границы рост тока может составлять до 2.5 раз по сравнению с нерасщепленной конфигурацией.

В **заключении** приведен перечень основных результатов и сформулированы основные выводы диссертации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе получены следующие **основные результаты**:

1. Построены модели эмиссии скользящих решеточных дислокаций из границ зерен разных типов (малоугловых, большеугловых и аморфных) и их тройных стыков в деформируемых нанокристаллических металлах и керамиках под действием внешнего напряжения, на основании которых впервые теоретически показано, что распад малоугловой границы способен вызвать цепной распад соседних малоугловых границ с образованием большого количества мобильных дислокаций, большеугловые и аморфные границы являются эффективными источниками частичных дислокаций, а также объяснен экспериментально наблюдаемый факт наличия аномально широких дефектов упаковки в нанокристаллическом алюминии.
2. Построены теоретические модели аккомодации межзеренного скольжения за счет расщепления и миграции границ зерен, диффузионного переползания зернограницных дислокаций и ротационной деформации в нанокристаллических материалах, предсказывающие существенный рост пластичности и/или вязкости разрушения материала по сравнению со случаем неаккомодированного межзеренного скольжения.
3. На базе концепции наномасштабного идеального пластического сдвига, представляющего собой эффективную альтернативу стандартному механизму зарождения дислокаций (решеточных и зернограницных), построены теоретические модели пластической деформации нанопроволок и массивных нанокристаллических материалов с порами, с помощью которых показано, что в условиях экстремально высоких приложенных напряжений механизм наномасштабного идеального пластического сдвига доминирует над стандартным дислокационным зарождением и скольжением.
4. Построены модели наномасштабных структурных трансформаций границ зерен в высокотемпературных сверхпроводниках, движущей силой которых является релаксация упругой энергии, а именно: перераспределение дислокационной плотности вдоль плоскости границ зерен, зарождение нанозерен с 90° границами наклона, неоднородное расщепление дислокаций в фасетированных границах; рассчитано изменение транспортных свойств (критического тока) в результате этих трансформаций.

Изложенные выше основные результаты позволяют сделать заключение, что основная цель работы достигнута: построены теоретические модели, достоверно описывающие процессы наномасштабной пластической деформации и структурные трансформации границ зерен в деформируемых нанокристаллических материалах, пленочных структурах и высокотемпературных сверхпроводниках.

Основные положения диссертации опубликованы в следующих работах:

- 1 С.В. Бобылев, Д.А. Дружинин, И.А. Овидько. Пластическая деформация нанопроволок посредством коллективного зарождения нановозмущений // *Физика и механика материалов*, 2012. — Т. 14, — № 1. — С. 47–56.
- 2 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances and nanoscale deformation twins in fcc nanowires // *Physical Review B*, 2011. — Vol. 83. — № 5. — P. 054111.
- 3 S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko. Cooperative grain boundary sliding and nanograin nucleation process in nanocrystalline, ultrafine-grained and polycrystalline solids // *Physical Review B*, 2011. — Vol. 84. — № 9. — P. 094103.
- 4 S.V. Bobylev, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko. Formation of nanocrystals due to giant-fault deformation in Gum Metals // *Scripta Materialia*, 2011. — Vol. 65. — P. 668–671.
- 5 С.В. Бобылев. Теоретические модели испускания дислокаций границами зерен в деформируемых нанокристаллических материалах // *Физика и механика материалов*, 2011. — Т. 12. — № 2. — С. 126–160.
- 6 S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Effects of intergrain sliding on crack growth in nanocrystalline materials // *International Journal of Plasticity*, 2010. — Vol. 26. — № 11. — P. 1629–1644.
- 7 S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko. Cooperative grain boundary sliding and migration process in nanocrystalline solids // *Physical Review Letters*, 2010. — Vol. 105. — № 5. — P. 055504.
- 8 С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько. Аккомодация зернограничного скольжения посредством миграции границ зерен в деформируемых наноматериалах // *Физика и механика материалов*, 2010. — Т. 10. — № 1/2. — С. 30–36.
- 9 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances in deformed nanowires // *Physical Review Letters*, 2009. — Vol. 103. — № 13. — P. 135501.
- 10 С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько. Зарождение дислокаций и рост наноскопических пор в деформируемых нанокерамиках // *Доклады Академии наук*, 2009. — Т. 425. — № 5. — С. 613–616.
- 11 S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko. Emission of partial dislocations from amorphous intergranular boundaries in deformed nanocrystalline ceramics // *Scripta Materialia*, 2009. — Vol. 60. — № 1. — P. 36–39.
- 12 S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko. Transition from plastic shear into rotation deformation mode in nanocrystalline metals and ceramics // *Reviews on Advances Materials Science*, 2009. — Vol. 19. — № 1/2. — P. 103–113.
- 13 S.V. Bobylev, A.K. Mukherjee, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Amorphous intergranular boundaries as toughening elements in nanocrystalline ceramics // *Reviews on Advances Materials Science*, 2009. — Vol. 21. — № 1. — P. 99–105.

- 14 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Mobility of triple junctions of grain boundaries during their migration in deformed nanocrystalline materials // *Reviews on Advances Materials Science*, 2009. — Vol. 22. — № 1/2. — P. 39–51.
- 15 С.В. Бобылев, И.А. Овидько. Зарождение нанозерен, наномасштабная аморфизация и трансформации дисклинаций в деформируемых наноматериалах // *Физика и механика материалов*, 2009. — Т. 8. — № 1. — С. 65–82.
- 16 S.V. Bobylev, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko. Theory of the nonplanar splitting of screw dislocations in Gum Metal // *Physical Review B*, 2008. — Vol. 77. — № 9. — P. 094115.
- 17 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanoscale amorphization at disclination quadrupoles in deformed nanomaterials and polycrystals // *Applied Physics Letters*, 2008. — Vol. 92. — № 6. — P. 061904
- 18 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanograin nucleation initiated by intergrain sliding and/or lattice slip in nanomaterials // *Applied Physics Letters*, 2008. — Vol. 8. — № 8. — P. 081914.
- 19 С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Перенос пластической деформации через аморфную межкристаллитную фазу в нанокерамиках // *Физика твердого тела*, 2008. — Т. 50. — № 10. — С. 1813–1819.
- 20 С.В. Бобылев, И.А. Овидько. Зарождение дислокаций на аморфных межзеренных границах в деформируемых нанокерамиках // *Физика твердого тела*, 2008. — Т. 50. — № 4. — С. 617–623.
- 21 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanograin nucleation through splitting and migration of grain boundaries in deformed nanomaterials // *Reviews on Advances Materials Science*, 2008. — Vol. 17. — № 1/2. — P. 76–89.
- 22 С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько. Испускание дислокаций порами в нанокристаллических металлах // *Физика твердого тела*, 2007. — Т. 49. — № 6. — С. 1044–1049.
- 23 С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман. Зарождение нанотрещин на аморфных прослойках в поликристаллическом кремнии // *Доклады Академии наук*, 2007. — Т. 414. — № 6. — С. 749–751.
- 24 С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Генерация скользящих полупетель расщепленных дислокаций границами зерен в нанокристаллическом // *Физика твердого тела*, 2006. — Т. 48. — № 8. — С. 1410–1420.
- 25 S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko. Emission of grain boundary dislocations by nanovoids in deformed polysilicon materials // *Reviews on Advances Materials Science*, 2006. — Vol. 13. — № 1. — P. 77–84.
- 26 S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Partial and split dislocation configurations in nanocrystalline metals // *Physical Review B*, 2006. — Vol. 73. — № 6. — P. 064102.
- 27 S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Transformations of grain boundaries in deformed nanocrystalline materials // *Acta Materialia*, 2004. — Vol. 52. — № 13. — P. 3793–3805.
- 28 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Partial and split dislocations in deformed nanocrystalline metals // *Reviews on Advances Materials Science*, 2004. — Vol. 7. — № 2. — P. 34–40.
- 29 S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Decay of low-angle tilt boundaries in deformed nanocrystalline materials // *Journal of Physics D: Applied Physics*,

2004. — Vol. 37. — № 2. — P. 269–272.
- 30 С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Цепной распад малоугловых границ наклона в нанокристаллических твердых телах // Физика твердого тела, 2004. — Т. 46. — № 11. — С. 1986–1990.
- 31 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Transformations of faceted grain boundaries in high-Tc superconductors // Physical Review B, 2003. — Vol. 67. — № 13. — P. 132506.
- 32 С.В. Бобылев, И.А. Овидько. Дислокационная структура и транспортные свойства малоугловых границ наклона в высокотемпературных сверхпроводниках // Журнал технической физики, 2003. — Т. 73. — № 6. — С. 61–65.
- 33 S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Nanograins with 90° grain boundaries in high transition temperature superconducting films // Journal of Physics: Condensed Matter, 2003. — Vol. 15. — № 46. — P. 7925–7937.
- 34 С.В. Бобылев, И.А. Овидько. Фасетированные границы зерен в поликристаллических пленках // Физика твердого тела, 2003. — Т. 45. — № 10. — С. 1833–1838.
- 35 S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Effects of misfit stresses on the structure and transport properties of grain boundaries in high-Tc superconducting films // Physical Review B, 2001. — Vol. 64. — № 22. — P. 224507.