

УДК 539.3:004.9

И. В. АЛЕКСАНДРОВ, Р. Г. ЧЕМБАРИСОВА

**КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ**

Представлена дислокационная модель, развитая для анализа эволюции микроструктуры и механизмов деформации нанокристаллических (НК) материалов с размером зерна менее 100 нм. В модели рассматривается результат совместного действия различных конкурирующих деформационных механизмов в процессе деформации НК образцов. Среди них такой специфический механизм деформации как испускание частичных дислокаций из границ зерен. Модель применена для исследования образцов меди, сконсолидированных методом интенсивной пластической деформации из порошков, полученных в результате шарового размола. Оценена активность отдельных деформационных механизмов; проанализирована эволюция структурных параметров в процессе деформации. *Нанокристаллические материалы; интенсивная пластическая деформация*

ВВЕДЕНИЕ

Как известно [1], размер зерен является одним из важнейших структурных параметров, определяющих деформационное поведение и механические свойства металлических материалов. В частности, уменьшение размера зерен существенным образом влияет на действующие механизмы деформации и приводит к повышению прочностных свойств металлов и сплавов. Особый интерес представляют металлические материалы с размером зерен менее 100 нм, что соответствует всего лишь десяткам и сотням параметров кристаллической решетки. Такие материалы называют нанокристаллическими (НК) материалами [2].

Основными методами получения объемных НК материалов являются метод электроосаждения [3], конденсационный метод [4], метод консолидации порошков [5], метод интенсивной пластической деформации (ИПД) [6]. Для полученных указанными методами НК материалов характерными отличительными признаками, в частности, являются наличие развитой сетки границ зерен и существенно меньшая плотность решеточных дислокаций, чем в зернах более крупнокристаллических деформированных металлических материалов [7–9]. Последнее наблюдение, по видимому, связано с ограничениями, накладываемыми на работу дислокационных источников и, в результате, отсутствием дислокационных скоплений в теле зерен. При этом

дислокации зарождаются и поглощаются границами зерен.

Экспериментальные исследования [10, 11], выполненные методом высокоразрешающей ПЭМ, позволили получить изображения структуры границ зерен в электроосажденном Ni со средним размером зерен 30–40 нм и в конденсированной из газообразной фазы и сконсолидированной НК Cu со средним размером зерна 5–50 нм. Был сделан вывод о том, что границы зерен в НК ГЦК металлах имеют структуру, подобную наблюдаемой в обычных поликристаллических материалах, и подтверждено кристаллическое строение этих границ. Результаты [12], полученные методом молекулярно-динамического моделирования, подтверждают этот факт.

В то же время как показали, в частности, исследования методом просвечивающей электронной микроскопии [13], границы зерен в НК материалах могут быть неравновесными и могут содержать зернограницные дислокации высокой плотности. Образование неравновесной дефектной структуры приводит к активизации зернограницных процессов. При этом происходит трансформация ансамбля зернограницных дислокаций, сопровождаемая уменьшением его энергии. Избыточные дислокации аннигилируют, а избыточные дислокации перемещаются в свои равновесные положения. Процесс релаксации зернограницных структур путем переползания и аннигиляции зернограницных дислокаций сопровождается интенсивным испус-

канием вакансий, что на несколько порядков ускоряет диффузию в НК твердых телах [14].

Механические свойства НК ГЦК металлов, в том числе Cu, Ni и Pd, изучались экспериментально в работах [15–21]. Оказалось, что данные металлы в НК состоянии обнаруживают значительно более высокий предел текучести и малое удлинение при растяжении по сравнению с металлами в микрокристаллическом (МК) состоянии со средним размером зерен $d > 1000$ нм. Твердость и предел текучести возрастают при уменьшении размера зерна, по крайней мере, до 15 нм. Причины такого поведения наноматериалов все еще обсуждаются.

Результаты проведенных экспериментальных исследований указывают на то, что при размерах зерен меньше, примерно, 10 нм напряжение течения уменьшается при дальнейшем уменьшении размера зерен [22–26]. При этом наблюдается обратный (отрицательный) эффект Холла–Петча. В то же время, как показывают эксперименты [6, 27], при значениях размера зерен $d < 50$ нм эмиссия частичных дислокаций из границ зерен становится основным деформационным механизмом. При достижении размеров зерен $d < 10$ нм главным деформационным механизмом становится зернограничное проскальзывание [28, 29].

Механическая модель деформационного поведения НК металлов, основанная на предположении об испускании частичных дислокаций из границ зерен, была развита Азаро и др. [30]. Было показано, что, когда размер зерна становится ниже некоторого критического значения, напряжение, требуемое для испускания частичных дислокаций значительно ниже напряжения, требуемого для испускания полных дислокаций. При этом напряжение, требуемое для испускания частичных дислокаций, является функцией энергии дефекта упаковки и модуля сдвига. В работе [31] были получены важные результаты, позволившие оценить не только критические значения напряжений и размеров зерен, при которых возможно испускание частичных дислокаций из границ зерен, но и напряжение начала процесса двойникования в НК материалах, рост двойников.

Упрочнение твердых тел определяется сопротивлением движению дислокаций и чувствительно к микроструктуре. Известно, что когерентные границы двойников способны блокировать движение дислокаций, поэтому создание высоких плотностей границ двойни-

ков ведет к упрочнению металла [32]. Так, например, как показывают недавние эксперименты, НК медь со средним размером 23 нм, полученная методом консолидации до полной плотности из порошка, подвергнутого шаровому размолу, упрочняется на стадии развитой пластической деформации, обнаруживает значительную пластичность (14% одностороннего удлинения) и имеет высокий предел текучести (791 ± 12 МПа) [5].

Таким образом, из сказанного выше следует, что НК материалы обладают специфической микроструктурой с развитой сеткой границ зерен. В процессе деформации в данных материалах могут активизироваться различные механизмы деформации, роль которых все еще требует уточнения.

Целью настоящей статьи является разработка модели деформационного поведения НК металлических материалов на основе доступных экспериментальных данных об их структуре и возможных деформационных механизмах. При этом разрабатываемая модель должна учитывать результат совместного действия различных конкурирующих деформационных механизмов в процессе деформирования образца, эволюцию структурных параметров, а также позволить оценить вклад отдельных деформационных механизмов в характер деформационного поведения исследуемых НК металлических материалов.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ РАЗВИТОЙ МОДЕЛИ

В соответствии с данными экспериментальных наблюдений [6, 27, 33] и согласно результатам молекулярно-динамического моделирования [12, 28, 29] в разработанной трехмерной модели считалось, что структура НК металлических материалов состоит из фрагментов со средним размером d . Для простоты геометрическая форма фрагментов была выбрана кубической с прямоугольными плоскостями скольжения $\{111\}$. Границы фрагментов содержали как избыточные, так и неизбыточные сидячие дислокации и точечные дефекты (вакансии), образующиеся при деформировании образца. В теле зерен-фрагментов находились частичные дислокации, деформационные двойники и дефекты упаковки, которые рассматривались как двойники с толщиной всего в один атомный слой [6].

Учет общей плотности дислокаций ρ_w и плотности неизбыточных сидячих дислокаций ρ_f в границах фрагментов позволил считать плотность избыточных сидячих дис-

локаций, а значит, и разориентировки между фрагментами.

Объемная доля границ f считалась постоянной и соответствовала значению, определяемому из соотношения, связывающего объем границ $V_{гз}$ и объем образца V с толщиной границы δ и средним размером зерен d [34],

$$f = \frac{V_{гз}}{V} = \frac{2\delta}{d}.$$

Считалось, что течение материала поддерживается за счет действия источников Франка-Рида, а также за счет размножения дислокаций при множественном поперечном скольжении. В границах фрагментов могла происходить аннигиляция дислокаций при их неконсервативном движении, обусловленном диффузией вакансий, а также аннигиляция краевых дислокаций в одной плоскости скольжения и путем двойного поперечного скольжения.

Под действием внешнего напряжения σ границами зерен могли испускаться головные частичные дислокации Шокли $\vec{b}_1 = a/6 [2\bar{1}1]$, $\vec{b}_2 = a/6 [11\bar{2}]$. Эти частичные дислокации могли образовываться в границах зерен в результате дислокационных реакций $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle + \frac{1}{2}\langle 101 \rangle \rightarrow 3 \times \frac{1}{6}\langle 211 \rangle$, или реакций, описанных в работе [31].

Учитывая сказанное, плотность частичных дислокаций считалась пропорциональной полной плотности дислокаций в границах фрагментов. При этом, поскольку в НК металлах с низкой и средней значениями энергии дефекта упаковки легче испускаются головные частичные дислокации, чем замыкающие, предполагалось, что дефекты упаковки охватывают все зерно и создают условия для формирования деформационных двойников [35].

Как известно [31], в поликристаллах образование двойников возможно только при достижении критического напряжения σ_{cr} , которому соответствует критическая деформация ε_{cr} . При этом приращение плотности двойников $d\rho_t$ в зависимости от объемной доли двойников f_t и плотности дислокаций ρ_w в границах фрагментов при степенях приведенной деформации $\varepsilon > \varepsilon_{cr}$ может быть описано с помощью уравнения

$$d\rho_t = (1 - f_t)P\rho_w d\varepsilon. \quad (1)$$

Здесь P — убывающая функция энергии дефектов упаковки. Приращение объемной

доли двойников описывается уравнением

$$df_t = v d\rho_t, \quad (2)$$

где v — объем двойника. Средний объем двойника можно представить как

$$\bar{v} = f_t/\rho_t. \quad (3)$$

Путем приближения к экспериментальной кривой зависимости среднего объема двойников от их объемной доли была установлена соответствующая аналитическая зависимость $\bar{v} = \phi(f_t)$ и с учетом равенств (2) и (3) вычислен объем двойника v . С учетом полученного значения объема двойника v уравнению (2) был придан вид, позволяющий вычислять изменение объемной доли двойников в зависимости от приращения степени деформации,

$$df_t = v(1 - f_t)P\rho_w d\varepsilon, \quad (4)$$

Дополнительное упрочнение в результате двойникования учитывалось с помощью аналитической зависимости, аналогичной закону Холла-Петча

$$\sigma_t = \alpha_t Gbz^{-\xi}, \quad (5)$$

где G — модуль сдвига, b — величина вектора Бюргерса, α_t — фактор, зависящий от числа дислокаций, заблокированных границами двойников, z — среднее расстояние между соседними двойниками. Значение параметра ξ может быть найдено в результате анализа вида экспериментальной деформационной кривой.

Считалось, что приведенное напряжение течения τ складывается из напряжения $\tau_d = \sigma_d/M^*$, где M^* — фактор Тейлора, связанного со скольжением дислокаций, и напряжения $\tau_t = \sigma_t/M^*$, связанного с двойникованием. Тогда, с учетом уравнения (5)

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_d(\varepsilon_d) + \sigma_t = \sigma_d(\varepsilon_d) + \alpha_t Gbz^{-\xi}. \quad (6)$$

Среднее расстояние между соседними двойниками z вычислялось на основе метода (Fullman's volumetric analysis) [36] с учетом толщины двойниковых дисков t и объемной доли двойников f_t :

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{2t} \frac{f_t}{(1 - f_t)}. \quad (7)$$

При этом считалось, что деформация ε представляет собой результат скольжения дислокаций (вклад в деформацию равен ε_d) и сдвига ε_t , связанного с двойникованием. В

случае ГЦК металлов вклад двойникования в деформацию равен $\varepsilon_t = (1/\sqrt{2})/M^*$ [37].

Таким образом, общее приращение деформации можно описать с помощью выражения

$$d\varepsilon = d\varepsilon_d + \varepsilon_t df_t. \quad (8)$$

Приведенное напряжение течения τ_d , связанное со скольжением дислокаций, вычислялось для различных степеней деформации в рамках дислокационной модели [38]:

$$\tau_d = f\tau_w + (1-f)\tau_c. \quad (9)$$

При этом считалось, что

$$\begin{aligned} \tau_w(\gamma_d) &= \alpha G b \sqrt{\rho_w} \left(\frac{\dot{\gamma}_w}{\dot{\gamma}_0} \right)^{1/m}, \\ \tau_c(\gamma_d) &= \alpha G b \sqrt{\rho_c} \left(\frac{\dot{\gamma}_c}{\dot{\gamma}_0} \right)^{1/m}. \end{aligned} \quad (10)$$

где α — постоянная, характеризующая характер взаимодействия между дислокациями, $\dot{\gamma}_0$ — предэкспоненциальный фактор, $1/m$ — величина, обратная чувствительности напряжения течения к скорости деформации, $\dot{\gamma}_w$ и $\dot{\gamma}_c$ — приведенные скорости сдвига в границах и внутренних областях фрагментов соответственно.

Для выполнения условия совместности деформации вдоль границы раздела фаз (внутренних областей и границ фрагментов) считалось, что $\dot{\gamma}_w = \dot{\gamma}_c = \dot{\gamma}_d$.

Эволюция плотности дислокаций в границах фрагментов была описана с помощью следующих уравнений [39]:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_w &= \frac{6P_f\beta^* \dot{\gamma}_d(1-f)^{2/3}}{b_1 df} + \\ &+ \frac{\sqrt{3}\beta^* \dot{\gamma}_d(1-f)\sqrt{\rho_w}}{fb_1} + \frac{\delta_f \rho_f^{1/2} \dot{\gamma}_d}{b} - \\ &- \delta_a \cdot \frac{\dot{\gamma}_d}{b} \cdot \rho_w - \frac{R_f \rho_f \dot{\gamma}_d}{b} - 2B' \rho_f^3; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_f &= \left(\frac{6P_f\beta^* \dot{\gamma}_d(1-f)^{2/3}}{b_1 df} + \right. \\ &+ \left. \frac{\sqrt{3}\beta^* \dot{\gamma}_d(1-f)\sqrt{\rho_w}}{fb_1} + \frac{\delta_f \rho_f^{1/2} \dot{\gamma}_d}{b} \right) P_f' - \\ &- \frac{R_f \rho_f \dot{\gamma}_d}{b} - 2B' \rho_f^3. \end{aligned} \quad (12)$$

В границах фрагментов плотность дислокаций растет за счет притока дислокаций из внутренних областей [40], активизации источников Франка-Рида дислокациями, приходящими из внутренних областей

[40], размножения дислокаций на дислокациях «леса», пересекающих плоскость скольжения [41]. Вклад перечисленных механизмов учитывается первыми тремя слагаемыми в уравнении (11) соответственно. Следующие слагаемые уравнения (11) описывают аннигиляцию винтовых дислокаций в результате двойного поперечного скольжения, типичного для стадии III деформационного упрочнения [42], аннигиляцию подвижных дислокаций с неизбыточными сидячими дислокациями [43] и аннигиляцию неизбыточных сидячих дислокаций, обусловленную их неконсервативным движением в результате захвата вакансий [44] соответственно. Плотность неизбыточных сидячих дислокаций изменяется со временем согласно уравнению (12).

Эволюция плотности дислокаций во внутренних областях фрагментов описывалась с помощью уравнения

$$\dot{\rho}_c = \alpha^* \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{\rho_w}}{b_1} \dot{\gamma}_d^r - \beta^* \frac{6\dot{\gamma}_d^r}{b_1 d(1-f)^{1/3}}. \quad (13)$$

Плотность дислокаций во внутренних областях возрастает за счет действия источников Франка-Рида в стенках границ, обращенных во внутреннюю область фрагментов [40]. Плотность дислокаций убывает за счет их стока в границы фрагментов [40].

Здесь α^* — коэффициент эффективности источников Франка-Рида, β^* — коэффициент эффективности стока дислокаций в границы фрагментов, P_f' — доля дислокаций леса из числа всех дислокаций, поступивших в границы фрагментов, P_f — доля дислокаций, имобилизованных в границах, δ_f — коэффициент размножения дислокаций на дислокациях леса, $\frac{\delta_a}{b}$ — коэффициент аннигиляции дислокаций при двойном поперечном скольжении, $\frac{\delta_a}{b} = \chi_a(0) \left(\frac{\dot{\gamma}_d}{\dot{\gamma}_0} \right)^{-1/n}$, R_f — длина аннигиляции, b_1 — вектор Бюргерса частичной дислокации.

$$\begin{aligned} B' &= \sqrt{2} / [\pi(1-\gamma)] D_c \cdot q_c(G\Omega/kT), \\ D_c &= D_{co} \cdot C_V \cdot \exp(-H_c^m/kT), \end{aligned} \quad (14)$$

где $\chi_a(0)$ — коэффициент аннигиляции дислокаций при температуре $T = 0$ К, n — параметр, зависящий от энергии дефекта упаковки и температуры, C_V — концентрация вакансий, образующихся при деформации,

H_c^m — энтальпия активации миграции вакансий вдоль дислокационных ядер [45], Ω — атомный объем, q_c — площадь поперечного сечения дислокационного ядра ($q_c = b^2$), G — модуль сдвига, D_c — коэффициент диффузии вдоль дислокационного ядра, D_{c0} — размерный множитель [39], $D_{c0} = 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$, ν — коэффициент Пуассона [46].

Перейдя в уравнении (11) от переменной t к переменной $\gamma_d = \varepsilon_d M^*$, построили зависимость функции $\phi = \phi'/\dot{\gamma}$, где $\phi' = 2BC_v$, $B = B'/C_v$, от $\frac{d\rho_w}{dt}$, исходя из условия, что ϕ пропорциональна концентрации вакансий C_v . При этом в первом приближении считали, что концентрация вакансий (функция ϕ) зависит линейно от деформации γ_d с коэффициентом пропорциональности C .

Учитывая последнее предположение, записали выражение

$$\phi \left(\frac{d\rho_w}{d\gamma_d} \Big|_{t+1} \right) = \phi \left(\frac{d\rho_w}{d\gamma_d} \Big|_t \right) + \frac{d\rho_w}{d\gamma_d} \Big|_t C d\gamma_d, \quad (15)$$

В результате стало возможным рассчитать эволюцию концентрации вакансий в зависимости от степени деформации с учетом полученных значений функции ϕ : $C_v = \phi \dot{\gamma}_d / 2B$.

Избыточная плотность дислокаций в границах определялась как разность между полной плотностью дислокаций ρ_w и плотностью избыточных сидячих дислокаций ρ_f в границах фрагментов:

$$\rho_{exc} = \rho_w - \rho_f. \quad (16)$$

Исходя из рассчитанной избыточной плотности дислокаций, вычисляли расстояние h между соседними дислокациями в границах фрагментов

$$h = \frac{1}{d\rho_{exc}} \quad (17)$$

и разориентировки между соседними фрагментами по методу, предложенному в работе [47]:

$$\theta = \frac{b}{h} = b d\rho_{exc}. \quad (18)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Тестовые расчеты в рамках разработанной модели были проведены на примере экспериментальных данных, представленных в работах [48, 32]. При этом объемные НК за-

готовки меди со 100% плотностью получали путем консолидации порошков, полученных при шаровом размоле, который проводился при температуре жидкого азота в течение 3 часов. Средний размер зерен составил 23 нм, микроискажения кристаллической решетки оказались равными 1%. Консолидация осуществлялась при комнатной температуре. При этом рентгеноструктурный анализ указал на понижение микроискажений кристаллической решетки до 0,1%.

Электронно-микроскопические исследования показали, что сконсолидированная медь содержит случайно ориентированные равноосные папозерна [48]. Статистический анализ нескольких темнопольных изображений выявил монотонное логнормальное распределение зерен по размерам.

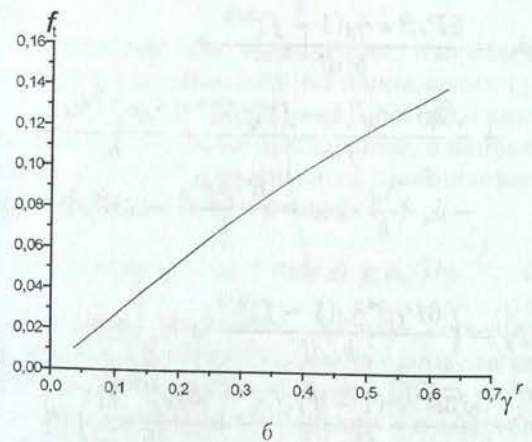
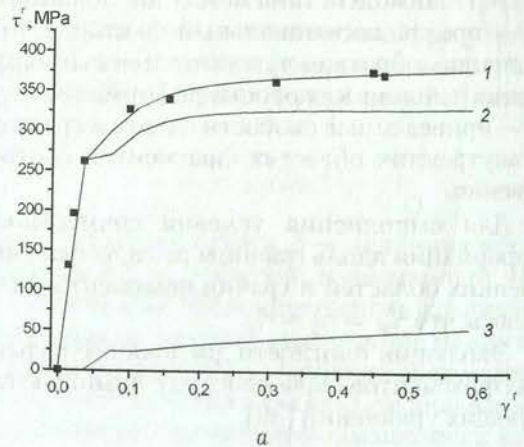


Рис. 1. а — экспериментальные (●) и модельные кривые (—) зависимости приведенного напряжения течения от степени приведенной деформации растяжением НК меди (1), эволюция напряжения τ_d , связанного со скольжением дислокаций, (2) и напряжения τ_s , связанного с двойникованием, (3); б — эволюция объемной доли двойников в зависимости от степени приведенной деформации растяжением НК меди. Фактор Тейлора равен 3,06

Таблица 1

Начальные значения моделируемых величин и константы модели

$\rho_w(\gamma = 0, 0), \text{ м}^{-2}$	$1,7 \times 10^{16}$	$\dot{\gamma}_0, \text{ с}^{-1}$	1	$b, \text{ нм}$	0,256
$\rho_c(\gamma = 0, 0), \text{ м}^{-2}$	$5,0 \times 10^{14}$	δ_f	0,013	$\Gamma, \text{ мДж/м}^2$	43,1
f	0,087	$G, \text{ ГПа}$	42,1	ζ	1,4
M^*	3,06	m	18	ε_{cr}	0,011
$\tilde{\gamma}$	3,2	n	3,6	$t(\varepsilon = \varepsilon_{cr}), \text{ нм}$	1,04
$\Omega, \text{ м}^3$	$1,1 \cdot 10^{-29}$	$D_{co}, \text{ м}^2/\text{с}$	10^{-4}	ν	0,343
$H_c^m, \text{ эВ}$	0,2				

На рис. 1 представлены экспериментальные точки, описывающие зависимость приведенного напряжения течения от степени приведенной деформации, полученные при растяжении образцов, изготовленных из сконсолидированных заготовок, при комнатной температуре со скоростью деформации $5 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$. Здесь же представлены соответствующая рассчитанная в рамках модели кривая деформации, а также кривые эволюции напряжения τ_d , связанного со скольжением дислокаций, напряжения τ_t , связанного с двойникованием, а также объемной доли двойников в зависимости от степени приведенной деформации.

Значения параметров моделирования и начальных значений моделируемых величин сведены в табл. 1.

Согласно работе [28], приведенное критическое напряжение, необходимое для испускания частичных дислокаций, можно оценить согласно соотношению

$$\frac{\tau_{cr}}{G} \approx \frac{1}{3} \frac{b}{d} + \frac{\vartheta - 1}{\vartheta} \frac{\Gamma}{Gb}, \quad (19)$$

где Γ — энергия дефекта упаковки, $\vartheta = d/\delta_{eq}$, $\delta_{eq} = \frac{1}{2\pi} \frac{Gb}{\Gamma}$.

Оценки данной величины для среднего размера зерен, равного 23 нм, дают значение $\tau_{cr} = 276,0 \text{ МПа}$, которому соответствует приведенная критическая деформация $\gamma_{cr} = \varepsilon_{cr} M^*$. Согласно работе [31], головные дислокации испускаются при меньших напряжениях, чем замыкающие дислокации. Значит, при значениях приведенного напряжения сдвига $\tau \geq \tau_{cr}$, формируется дефект упаковки, что является в случае ГЦК металлов, условием начала двойникования.

По причине отсутствия экспериментальных данных о величине среднего объема двойника в НК меди, воспользуемся экспериментальными результатами, полученными для сплава Co-33Ni с аналогичной решеткой при температуре $T = 293 \text{ К}$. Согласно этим данным средний объем \bar{v} двойника зависит от

объемной доли двойников f_t и температуры. С увеличением объемной доли двойников средний объем двойника уменьшается по нелинейному закону

$$\bar{v} = \bar{v}_0(1 - \zeta f_t)^3. \quad (20)$$

При температуре $T = 293 \text{ К}$ параметр ζ оказался равным 1,4, \bar{v}_0 — средний объем исходных двойников.

С учетом равенств (2), (3) и (19) уравнение (4) приводится к виду, удобному для численного интегрирования:

$$\int_0^{f_t} \frac{(1 + 2\zeta f_t)}{(1 - \zeta f_t)^4(1 - f_t)} df_t = \int_{\varepsilon_{cr}}^{\varepsilon} \bar{v}_0 P \rho_w d\varepsilon. \quad (21)$$

В случае ГЦК металлов можно считать, с учетом принятой здесь геометрии задачи, что средний объем двойника $\bar{v} = d_t^2 t$, где t — толщина двойникового диска, $d_t = d(1 - f)^{1/3}$ — длина двойника.

Значения параметров, полученных путем приближения к экспериментальной кривой, соответствующей деформации растяжением НК образца меди, сведены в табл. 2.

Таблица 2

Конечные значения параметров моделирования

α^*	0,643	C	8,2	α	1,1
β^*	0,192	\tilde{R}_f	3,0	$\alpha_t, \text{ м}^{\xi-1}$	0,07
$\chi_a(0)$	9,3	P_f	0,92	$\bar{v}_0 P, \text{ м}^2$	20,0
K	1,01	P'_f	0,041	ξ	1/5

Модель позволила рассчитать эволюцию плотности частичных дислокаций во внутренних областях фрагментов, двойников (число двойников в единице объема), плотности дислокаций в границах фрагментов и полной плотности дислокаций (рис. 2), разориентировки между фрагментами (рис. 3), объемной доли двойников (рис. 1) в зависимости от степени деформации.

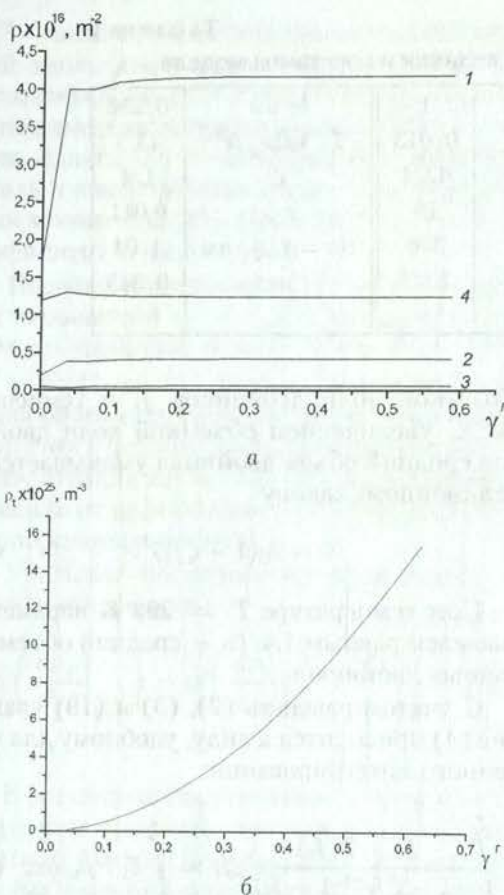


Рис. 2. а — плотности дислокаций (1 — в границах фрагментов, 2 — полная, 3 — во внутренних областях фрагментов, 4 — избыточных сидячих в границах фрагментов); б — эволюция объемной плотности двойников в НК меди в зависимости от степени приведенной деформации при растяжении

Полученные результаты позволяют судить о вкладе границ двойников в упрочнение НК меди. Увеличение объемной доли двойников приводит к упрочнению материала. Рост плотности дислокаций во внутренних областях фрагментов свидетельствует о возрастании барьерной функции двойниковых границ.

Например, если произойдет реакция диссоциации $\frac{1}{2} [101] \rightarrow \frac{1}{6} [1\bar{2}1] + \frac{1}{3} [111]$, то дислокация $\frac{1}{6} [1\bar{2}1]$ будет распространяться через двойник, а дислокация Франка $\frac{1}{3} [111]$ останется у границы двойника [3]. Диссоциация дислокаций требует концентрации напряжения у пересечения «двойник–полоса скольжения», что ведет к упрочнению материала. Упрочняющее действие границ двойников было подтверждено в результате *in situ* ПЭМ наблюдений деформационного процесса в НК образце меди [49]. Большинство дислокаций было расположено у границ двойни-

ков на расстояния от нескольких до десятков нанометров, в то время как лишь несколько было видно внутри двойников. Результаты моделирования показывают, что пластичность образца связана в основном с дислокационной активностью. Увеличение объемной доли двойников не даст значительного вклада в пластичность (рис. 4, а).

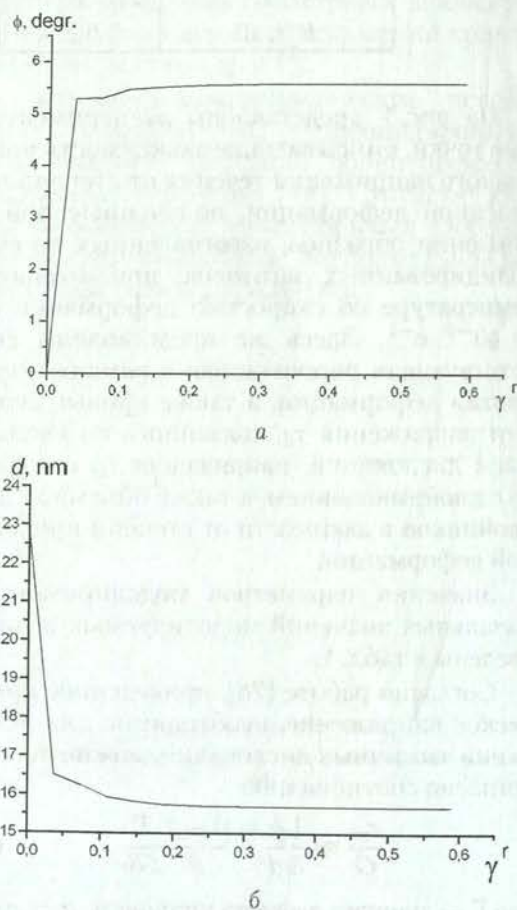


Рис. 3. Эволюция разориентировок между фрагментами (а) и среднего размера фрагментов (б) в зависимости от приведенной деформации

На основе модели было оценено влияние отдельных деформационных механизмов на наблюдаемые экспериментально особенности механического поведения наноматериалов.

Деформационное двойникование оказывает существенное влияние на характер эволюции структуры. До момента начала двойникования происходит резкое увеличение плотности дислокаций в границах фрагментов (рис. 2). Как показал численный анализ вклада отдельных слагаемых уравнения (11) в эволюцию плотности дислокаций ρ_w , это происходит главным образом за счет иммобилизации дислокаций, поступающих из внутренних областей, и активизации ими источников Франка–Рида в границах фрагментов.

При этом увеличение плотности дислокаций механизмом размножения при множественном скольжении на два порядка меньше. Причем все перечисленные механизмы выражены более сильно в связи с возросшей чувствительностью напряжения течения к скорости деформации, по сравнению с меньшими значениями характерными для ультрамелкозернистых состояний [39]. Известно, что НК материалы характеризуются возросшим значением чувствительности напряжения течения к скорости деформации (уменьшением параметра m). Соответственно растут разориентировки между соседними фрагментами (рис. 3). Наблюдается рост полной плотности дислокаций и плотности избыточных сидячих дислокаций, но он выражен слабо (рис. 2). Происходит резкое уменьшение среднего размера фрагментов, резко возрастает концентрация вакансий (рис. 3, 4, б).

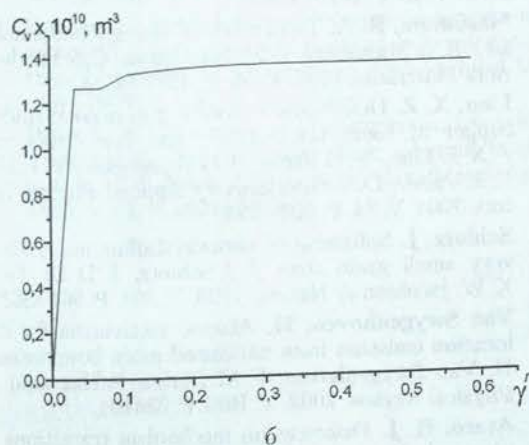
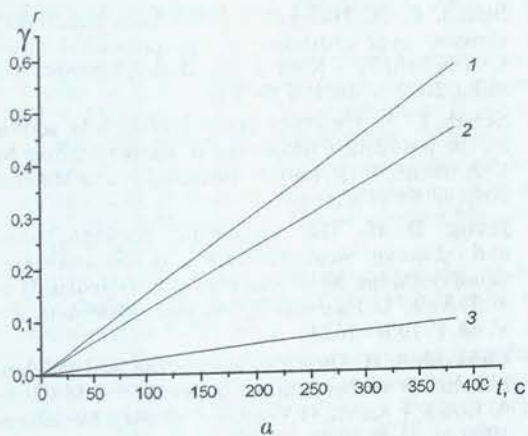


Рис. 4. а — деформация образца в зависимости от времени (1); деформация, вызванная дислокационной активностью (2); деформация, полученная за счет двойникования образца (3); б — эволюция концентрации вакансий в зависимости от приведенной деформации

После начала деформационного двойникования происходит значительное снижение

скорости роста плотности дислокаций в границах фрагментов, полной плотности дислокаций (рис. 2), что связано с сильными аннигиляционными процессами при двойном поперечном скольжении (маленькие значения параметров m и n). Параметр n выбирается меньше значения m . В данной работе их отношение равно 5. Захват красных дислокаций в границах фрагментов и аннигиляция при неконсервативном движении дислокаций также играют значительную роль в связи с уменьшением параметра m в случае НК материалов. Соответственно плотность избыточных сидячих дислокаций медленно падает (рис. 2). Плотность дислокаций во внутренних областях фрагментов возрастает, переходя, как и плотности ρ_w , ρ_{tot} , ρ_f (рис. 2), в состояние насыщения. Резко уменьшается скорость роста разориентировок и скорость уменьшения среднего размера фрагментов, значения которых становятся равновесными (рис. 3).

Резко снижается скорость роста концентрации вакансий, в пределе концентрация вакансий достигает своего значения насыщения, равного $\approx 1,36 \times 10^{-10} \text{ м}^{-3}$ (рис. 4, б). Этим объясняется рост аннигиляции дислокаций при их неконсервативном движении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты моделирования показали, что разработанная модель в целом непротиворечиво описывает деформационное поведение и эволюцию структуры в случае НК меди. В то же время были высказаны предположения о том, что упрочнение материала на стадии развитой пластической деформации находится в прямой зависимости от объемной доли деформационных двойников. Увеличение плотности двойников сопровождается ограничением испускания дислокаций во внутренние области фрагментов и возрастанием барьерной функции двойников, что связано с увеличением протяженности их когерентных границ. Пластичность достигается в основном за счет дислокационной активности в границах фрагментов.

Увеличение чувствительности напряжения течения к скорости деформации (уменьшение параметра m) в НК материалах приводит к усилению механизмов накопления и аннигиляции дислокаций. Возрастает роль диффузионных процессов, но они в приведенных условиях не являются еще решающими. Параметр n оказывает колоссальное влияние на

аннигиляцию дислокаций при двойном попережном скольжении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фридель, Ж. Дислокации / Ж. Фридель. М.: Мир, 1967. 643 с.
2. Gleiter, H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure / H. Gleiter // *Acta materialia*. 2000. V. 48. P. 1–29.
3. Lu, L. Ultrahigh strength and high electrical conductivity in Copper / L. Lu, Y. Shen, X. Chen, L. Qian, K. Lu // *Science*. 2004. V. 304. P. 422–426.
4. Sanders, P. G. Creep of nanocrystalline Cu, Pd, and Al-Zr / P. G. Sanders, M. Rittner, E. Kiedaisch, J. R. Weertman, H. Kung, Y. C. Lu // *Nanostructured Materials*. 1997. V. 9. P. 433–440.
5. Ma, E. Eight routes to improve the tensile ductility of bulk nanostructured metals and alloys / E. Ma // *JOM*. 2006. V. 4. P. 49–53.
6. Liao, X. Z. Stacking fault and twinning in nanocrystalline metals / X. Z. Liao, Y. H. Zhao, S. G. Srinivasan, F. Zhou, E. J. Lavernia, M. I. Baskes, H. F. Hu, R. Z. Valiev [ed. by Yuntian T. Zhu, Terence G. Langdon, Ruslan Z. Valiev, S. Lee Semiatin, Dong H. Shin, Terry C. Lowe] // *Proc. Conf. Ultrafine Grained Materials III*, TMS, Warrendale, Pennsylvania, USA. 2004. P. 3–10.
7. Ахмадеев, Н. А. Формирование субмикроструктуры в меди и никеле с использованием интенсивного сдвигового деформирования / Н. А. Ахмадеев, Р. З. Валиев, В. И. Копылов, Р. Р. Мулюков // *Известия РАН. Металлы*. 1992. № 5. С. 95–102.
8. Valiev, R. Z. Deformation behaviour of ultrafine-grained copper / R. Z. Valiev, E. V. Kozlov, Yu. F. Ivanov, J. Lian, A. A. Nazarov, B. Baudalet // *Acta Metall. Materialia*. 1994. V. 42. P. 2467–2475.
9. Валиев, Р. З. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией / Р. З. Валиев, И. В. Александров. М.: Логос, 2000. 272 с.
10. Kumar, K. S. Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel / K. S. Kumar, S. Suresh, M. F. Chisholm, J. A. Horton, P. Wang // *Acta Materialia*. 2003. V. 51. P. 387–405.
11. Thomas, G. J. Grain boundaries in nanophase palladium: High resolution electron microscopy and image simulation / G. J. Thomas, R. W. Siegel, J. A. Eastman // *Scripta Metall. Materialia*. 1990. V. 24. P. 201–206.
12. Van Swygenhoven, H. Grain boundary structure and its influence on plastic deformation of polycrystalline fcc metals at the nanoscale: a molecular dynamic study / H. Van Swygenhoven, A. Caro, D. Farkas // *Scripta Materialia*. 2001. V. 44. P. 1513–1516.
13. Valiev, R. Z. Structure and Deformation Behaviour of Armcro Iron Subjected to Severe Plastic Deformation / R. Z. Valiev, Yu. V. Ivanisenko, E. F. Ranch, B. Baudalet // *Acta Materialia*. 1996. V. 44. P. 4705–4712.
14. Овидько, И. А. Переползание зернограницных дислокаций и диффузия в нанокристаллических твердых телах / И. А. Овидько, А. Б. Рейзис // *Физика твердого тела*. 2001. Т. 43, № 1. С. 35–38.
15. Sanders, P. G. Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium / P. G. Sanders, J. A. Eastman, J. R. Weertman // *Acta Materialia*. 1997. V. 45. P. 4019–4025.
16. Ebrahimi, F. Deformation and fracture of electrodeposited copper / F. Ebrahimi, Q. Zhai, D. Kong // *Scripta Materialia*. 1998. V. 39. P. 315–321.
17. Lu, L. An abnormal strain rate effect on tensile behavior in nanocrystalline copper / L. Lu, S. X. Li, K. Lu // *Scripta Materialia*. 2001. V. 45. P. 1163–1169.
18. Dalla Torre, F. Nanocrystalline electrodeposited Ni: microstructure and tensile properties / F. Dalla Torre, H. Van Swygenhoven, M. Victoria // *Acta Materialia*. 2002. V. 50. P. 3957–3970.
19. Ebrahimi, F. Mechanical properties of nanocrystalline nickel produced by electrodeposition / F. Ebrahimi, G. R. Bourne, M. S. Kelly, T. E. Matthews // *Nanostructured Materials*. 1999. V. 11. P. 343–350.
20. Legros, M. Microsample tensile testing of nanocrystalline metals / M. Legros, B. R. Elliott, M. N. Rittner, J. R. Weertman, K. J. Hemker // *Philosophical Magazine A*. 2000. V. 80. P. 1017–1026.
21. Wang, Y. M. Microsample tensile testing of nanocrystalline copper / Y. M. Wang, K. Wang, D. Pan, K. Lu, K. J. Hemker, E. Ma // *Scripta Materialia*. 2003. V. 48. P. 1581–1586.
22. Schuh, C. A. Hall-Petch breakdown manifested in abrasive wear resistance of nanocrystalline nickel / C. A. Schuh, T. G. Nieh, T. Yamasaki // *Scripta Materialia*. 2002. V. 46. P. 735–740.
23. Schuh, C. A. The effect of solid solution W additions on the mechanical properties of nanocrystalline Ni / C. A. Schuh, T. G. Nieh, H. Iwasaki // *Acta Materialia*. 2003. V. 51. P. 431–443.
24. Jeong, D. H. The relationship between hardness and abrasive wear resistance of electrodeposited nanocrystalline Ni-P coatings / D. H. Jeong, U. Erb, K. T. Aust, G. Palumbo // *Scripta Materialia*. 2003. V. 48. P. 1067–1072.
25. Chokshi, A. H. On the validity of the Hall-Petch relationship in nanocrystalline materials / A. H. Chokshi, A. Rosen, J. Karch, H. Gleiter // *Scripta Metallurgica*. 1989. V. 23. P. 1679–1683.
26. Masumura, R. A. Yield stress of fine grained materials / R. A. Masumura, P. M. Hazzledine, C. S. Pande // *Acta Materialia*. 1998. V. 46. P. 4527–4534.
27. Liao, X. Z. Deformation twinning in nanocrystalline copper at room temperature and low strain rate / X. Z. Liao, Y. H. Zhao, S. G. Srinivasan, Y. T. Zhu, R. Z. Valiev, D. V. Gunderov // *Applied Physics Letters*. 2004. V. 84. P. 592–594.
28. Schiotz, J. Softening of nanocrystalline materials at very small grain sizes / J. Schiotz, F. D. Di Tolla, K. W. Jacobsen // *Nature*. 1998. V. 391. P. 561–563.
29. Van Swygenhoven, H. Atomic mechanism for dislocation emission from nanosized grain boundaries / H. Van Swygenhoven, P. M. Derlet, A. Hasnaoui // *Physical Review*. 2002. V. B66. P. 024101.
30. Asaro, R. J. Deformation mechanism transitions in nanoscale fcc metals / R. J. Asaro, P. Krysl, B. Kad // *Phil. Mag. Letters*. 2003. V. 83, No. 12. P. 733–743.
31. Zhu, Y. T. Nucleation of deformation twins in nanocrystalline face-centered-cubic metals processed by severe plastic deformation / Y. T. Zhu, X. Z. Liao, S. G. Srinivasan, E. J. Lavernia // *J. of Applied Physics*. 2005. V. 98. P. 034319.
32. Christian, J. W. Deformation twinning / J. W. Christian, S. Mahajan // *Progress in Materials Science*. 1995. V. 39. P. 1–157.

33. **Рыбин, В. В.** Большие пластические деформации и разрушение металлов / В. В. Рыбин. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
34. **Grabski, M. V.** Yield stress dependence on the spreading of the extrinsic grain boundary dislocations and the non-equilibrium of grain boundaries / M. V. Grabski, R. Z. Valiev, J. W. Wyrzykowsky, W. Lojkowski // *Res. Mechanica Letters*. 1981. V. 1. P. 489–496.
35. **Liao, X. Z.** Formation mechanism of wide stacking faults in nanocrystalline Al / X. Z. Liao, S. G. Srinivasan, Y. H. Zhao, M. I. Baskes, Y. T. Zhu, F. Zhou, E. J. Lavernia, H. F. Hu // *Applied Physics Letters*. 2004. V. 84. P. 3564–3566.
36. **Remy, L.** Kinetics of f. c. c. deformation twinning and its relationship to stress-strain behavior / L. Remy // *Acta metallurgica*. 1978. V. 26. P. 443–451.
37. **Полухин, П. И.** Физические основы пластической деформации: учебное пособие для вузов / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. М.: Металлургия, 1982. 584 с.
38. **Toth, L. S.** Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model / L. S. Toth, A. Molinari, Y. Estrin // *J. of Engineering Materials and Technology*. 2002. V. 124. P. 71–77.
39. **Alexandrov, I. V.** Analysis of the deformation mechanisms in bulk ultrafine grained metallic materials / I. V. Alexandrov, R. G. Chembarisova, V. D. Sitdikov // *Materials Science and Engineering*. (In press).
40. **Estrin, Y.** A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation / Y. Estrin, L. S. Toth, A. Molinari, Y. Brochet // *Acta Materialia*. 1998. V. 46. P. 5509–5522.
41. **Popov, L. E.** Plastic deformation of the alloys / L. E. Popov, V. C. Kobytsev, T. A. Kovalevskaya. М.: Metallurgiya, 1984. 182 p.
42. **Малыгин, Г. А.** Аннигиляция дислокаций двойным поперечным скольжением как механизм динамического отдыха / Г. А. Малыгин // *Физика твердого тела*. 1987. Т. 29, № 7. С. 2067–2072.
43. **Essman, U.** Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities / U. Essman, H. Mughrabi // *Philosophical Magazine*. 1979. V. 40. P. 731–756.
44. **Prinz, F. B.** The evolution of plastic resistance in large strain plastic flow of single phase subgrain forming metals / F. B. Prinz, A. S. Argon // *Acta Metallurgica*. 1984. V. 32. P. 1021–1028.
45. **Zehetbauer, M.** Cold work hardening in stages IV and V of fcc metals II: Model fits and physical results / M. Zehetbauer // *Acta materialia*. 1993. V. 41. P. 589–599.
46. **Zehetbauer, M.** Cold work hardening in stages IV and V of f. c. c. metals—I. Experiments and Interpretation / M. Zehetbauer, V. Seumer // *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993. V. 41. P. 577–588.
47. **Pantleon, W.** On the statistical origin of disorientation in dislocation structure / W. Pantleon // *Acta Materialia*. 1998. V. 46. P. 451–456.
48. **Youssef, K. M.** Ultrahigh strength and high ductility of bulk nanocrystalline copper / K. M. Youssef, R. O. Scattergood, K. L. Murty, J. A. Horton, C. C. Koch // *Applied Physics Letters*. 2005. V. 87. P. 091904.
49. **Yongdahl, C. J.** Deformation behavior in nanocrystalline copper / C. J. Yongdahl, J. R. Weertman, R. C. Hugo, H. H. Kung // *Scripta Materialia*. 2001. V. 44. P. 1475–1478.
50. **Chen, J.** Hardness and strain rate sensitivity of nanocrystalline Cu / J. Chen, L. Lu, K. Lu // *Scripta Materialia*. 2006. V. 54. P. 1913–1918.

ОБ АВТОРАХ



Александров Игорь Васильевич, проф., зав. каф. физики, вед. науч. сотр. ИФПМ НИЧ УГАТУ. Дипл. физик (БГУ, 1976). Д-р физ.-мат. наук по физике твердого тела (ИФМ УрНЦ РАН, 1997). Иссл. в обл. физики интенсивных пластических деформаций.



Чембарисова Роза Галиевна, доц. каф. физики. Дипл. физик (БГУ, 1980). Канд. техн. наук (Азерб. индустр. ун-т, 1992). Иссл. в обл. физики интенсивных пластических деформаций.