Прочность и пластичность нанометаллов с бимодальной зеренной структурой

© Г.А. Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: malygin.ga@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 11 октября 2007 г.)

На основе уравнений дислокационной кинетики теоретически обсуждаются структурные факторы, от которых зависят прочность и пластические свойства нанометаллов с бимодальной зеренной структурой, содержащей наряду с нанозернами определенную объемную долю зерен микронных размеров. Найдено существенное улучшение пластичности (рост величины равномерной деформации) нанометаллов с бимодальной структурой по сравнению с одномодальной при сохранении высокой прочности последней. Такое улучшение может быть достигнуто при определенном сочетании факторов, таких как соотношение размеров и объемных долей нано- и микрозерен в бимодальной структуре и величины параметра, определяющего эффективность границ зерен как источников дислокаций.

PACS: 62.25.+g, 62.20.Fe, 61.72.Cc

1. Введение

Высокая прочность нано- и субмикрокристаллических металлов и сплавов сопровождается одновременно сильным снижением у них величины равномерной деформации ε_u , когда деформация теряет устойчивость и на растягиваемом образце возникает область локализации деформации (шейка). В результате, как показывают эксперименты, разрушение (пластическое разделение) наноматериала наступает на начальной стадии его деформации при $\varepsilon_u = 1-3\%$ [1–6]. Отсутствие необходимого запаса пластичности (квазиохрупчивание) является существенным недостатком нано- и субмикрокристаллических металлов и сплавов и служит препятствием для их практического применения.

Согласно критерию Консидера возникновения пластической неустойчивости типа шейки $d\sigma/d\varepsilon \leq \sigma$, сильная чувствительность к ней наноматериалов обусловлена двумя обстоятельствами: 1) сильным ростом их напряжения течения σ при измельчении зерен (эффект Холла–Петча) и 2) снижением коэффициента деформационного упрочнения $d\sigma/d\varepsilon$ из-за отсутствия размножения дислокаций на дислокациях леса, когда размер зерен d становится меньше $1 \mu m$ [7,8]. Для повышения коэффициента деформационного упрочнения и увеличения тем самым величины равномерной деформации в [1–3] предлагается использовать композитную, бимодальную структуру наноматериала, состоящую из зерен нано- или субмикронного диапазона и некоторой доли $f \approx 0.25$ [1] зерен микронного, $d = 1 - 10 \,\mu$ m, масштаба. Такие бимодальные зеренные структуры можно создать путем частичной рекристаллизации сильно деформированных [1] или полученных компактированием нанопорошков металлов [9]. Соответствующие эксперименты, проведенные с бимодульными наномикрозеренными структурами как в чистых металлах (Си [1]), так и в сплавах (Al-Mg [9], ферритная сталь [10]), показали существенный рост у них величины равномерной деформации при менее существенном снижении их прочности. Теоретические расчеты [7,11,12] на моделях бимодальных структур наноматериалов качественно подтвердили эффект повышения их пластичности по сравнению с одномодальными нанозеренными структурами.

Целью настоящей работы является выяснение условий и структурных факторов, от которых зависит оптимальное сочетание прочностных и пластических свойств наноматериалов с бимодальной зеренной структурой. Для этого будет использован основанный на уравнениях дислокационной кинетики подход к анализу прочностных и пластических свойств нано- и микрокристаллических материалов [8], позволяющий описать их более детально по сравнению с ранее используемыми моделями этих структур [7,11,12]. В разделе 1 приведены необходимые для этого теоретические соотношения. В разделе 2 они используются для анализа зависимости от размера зерен d характеристик прочности и пластичности (пределы текучести σ_v и прочности σ_u , величины равномерной деформации ε_{μ}) наноматериалов с одномодальной (unimodal), а в разделе 3 — с бимодальной (bimodal) зеренными структурами.

2. Основные соотношения

Кинетическое уравнение для средней плотности дислокаций ρ в поликристаллическом материале при варьировании размера зерен d в широком диапазоне от нескольких нанометров до нескольких сотен микрон имеет вид [8]:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \left(\frac{\beta}{bd} + k_f \rho^{1/2}\right) - (k_a + k_b)\rho. \tag{1}$$

Здесь γ — величина сдвиговой деформации, $\beta = \beta_g + \beta_{GN}$ — коэффициент, определяющий интенсивности накопления дислокаций в объеме зерен вследствие

ограничения длины их свободного пробега размером зерна ($\beta_g \approx 1$ [13]) и генерации геометрически необходимых дислокаций из-за несовместимости пластических деформаций зерен ($\beta_{GN} = 1/4$ [14]); $k_f = \delta_f/b$ — коэффициент, определяющий интенсивность размножения дислокаций на дислокациях леса $(bk_f = \delta_f \approx 10^{-2})$ [15], *b* — вектор Бюргерса; *k_a* — коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций механизмом поперечного скольжения, определяющий интенсивность динамического отдыха деформированного металла [15,16]; $k_b = 4\eta D_{gb}/m\dot{\varepsilon}d^2$ — коэффициент аннигиляции краевых дислокаций, аккумулированных в границах нанозерен, определяющий интенсивность зернограничного разупрочнения наноматериала и возникновения обратного соотношения Холла-Петча при размерах нанозерен меньше 10–15 nm [8,17], $D_{gb} = D_{gb}(T)$ — коэффициент зернограничной диффузии, Т — температура, $\eta \approx \mu b^3/k_B T$, μ — модуль сдвига, k_B — постоянная Больцмана, $\dot{\varepsilon} = \dot{\gamma}/m$ и $\dot{\gamma}$ — скорости деформации растяжения и сдвиговой деформации соответственно, *m* = 3.05 — ориентационный фактор Тейлора.

В случае нано- и субмикрокристаллических металлов с размером зерен $d < 1 \mu m$, интегрируя уравнение (1) в отсутствие в правой его части слагаемого $k_f \rho^{1/2}$, получаем согласно соотношению Тейлора $\tau = a \mu b \rho^{1/2}$ следующую зависимость напряжения течения $\sigma = m\tau$ от деформации растяжения $\varepsilon = \gamma/m$:

$$\sigma(\varepsilon) = m\alpha\mu b \left[\rho_0 \exp(-mk\varepsilon) + \rho_m (1 - \exp(-mk\varepsilon)) \right]^{1/2},$$
(2)

где α — коэффициент взаимодействия дислокаций, $\rho_0 = \beta_0/bd$ — начальная ($\varepsilon = 0$) плотность дислокаций в результате их эмиссии из границ зерен [8,18], $\rho_m = \beta/bdk$ — плотность дислокаций при $\varepsilon \to \infty$, $k = k_a + k_b$. На пределе текучести, т. е. при деформации $\varepsilon_y = 0.2\%$, зависимость напряжения течения от размера зерна, согласно (2), имеет вид

$$\sigma_{y} = \sigma(\varepsilon_{y}) = m\alpha\mu \left(\frac{b}{d}\right)^{1/2} \times \left[\beta_{0} \exp(-mk_{b}\varepsilon_{y}) + \frac{\beta}{k_{b}}\left(1 - \exp(-mk_{b}\varepsilon_{y})\right)\right]^{1/2}, \quad (3a)$$

где, согласно обозначениям в уравнении (1), $k_b = (d_b/d)^2$, $d_b = (4\eta D_{gb}/m\dot{\epsilon})^{1/2}$. В чистых Cu, Ni и α -Fe при комнатной температуре и $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \, {\rm s}^{-1}$ $d_b \approx 100-200 \, {\rm nm}$ [8,17]. При записи (3a) учтено, что в нанокристаллическом металле коэффициент $k_a = 0$ ввиду отсутствия достаточного пространства внутри нанозерен для аннигиляции винтовых дислокаций механизмом поперечного скольжения. Далее, подставляя напряжение (2) в критерий пластической неустойчивости Консидера $d\sigma/d\epsilon \leq \sigma$, находим зависимости величины равномерной деформации ϵ_u и условного предела прочности σ_u от размера нанозерен и других параметров уравнения (2):

$$\sigma_u = \sigma_b \left(\frac{d_b}{d}\right)^{1/2} \left(\frac{m/2}{1 + (1/2)mk_b}\right)^{1/2}, \qquad (3b)$$

$$\varepsilon_{u} = \frac{1}{mk_{b}} \left[\ln \left(1 + \frac{1}{2} mk_{b} \right) + \ln \left(1 - \frac{\beta_{0}}{\beta} k_{b} \right) \right], \quad (3c)$$

где $\sigma_b = m \alpha \mu (\beta b/d_b)^{1/2}$.

При величине зерен $d > 1 \,\mu$ т внутри них формируется ячеистая дислокационная структура, что свидетельствует о размножении дислокаций на дислокациях леса в некомпланарных плоскостях скольжения. Изза большого по сравнению с нанометаллами размера микрозерен аннигиляция дислокаций в их границах при 293 К не протекает. В этом случае, решая уравнение (1) при $k_b = 0$ и отсутствии в его правой части первого слагаемого, получаем согласно соотношению Тейлора $\sigma \sim \rho^{1/2}$ следующую зависимость напряжения течения от величины пластической деформации:

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{1}{2}mk_a\varepsilon\right) + \sigma_3\left(1 - \exp\left(-\frac{1}{2}mk_a\varepsilon\right)\right),\tag{4}$$

где $\sigma_0 = m\alpha\mu b\rho_0^{1/2}$ — начальное ($\varepsilon = 0$) напряжение в результате эмиссии дислокаций из границ зерен [8,18], $\sigma_3 = m\alpha\mu b\rho_3^{1/2}$ — напряжение течения и плотность дислокаций $\rho_3 = (k_f/k_a)^2$ при $\varepsilon \to \infty$. Согласно (4) и критерию Консидера для пределов текучести и прочности, а также величины равномерной деформации, имеем в результате следующие соотношения:

$$\sigma_{y} = \sigma(\varepsilon_{y}) = m\alpha\mu \left[\left(\frac{\beta_{0}b}{d} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} mk_{a}\varepsilon_{y} \right) + \frac{bk_{f}}{k_{a}} \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{2} mk_{a}\varepsilon_{y} \right) \right) \right], \quad (5a)$$

$$\sigma_u = \frac{\theta_2}{1 + (1/2)mk_a},\tag{5b}$$

$$\varepsilon_u = \frac{2}{mk_a} \left[\ln\left(1 + \frac{1}{2}mk_a\right) + \ln\left(1 - \left(\frac{d_a}{d}\right)^{1/2}\right) \right], \quad (5c)$$

где $d_a = \beta_0 k_a^2 b/(bk_f)^2$, $\theta_2 = m^2 \vartheta_2$, $\theta_2 = (1/2) \alpha \mu (bk_f)$ — коэффициент деформационного упрочнения на второй (линейной) стадии кривых деформационного упрочнения ГЦК-кристаллов. В ГЦК-металлах $\vartheta_2/\mu \approx \approx (2 - 2.5) \cdot 10^{-3}$ [19].

Приведенные выше соотношения для прочностных и деформационных свойств нано-, субмикро- и микрокристаллических металлов будут использованы в следующих разделах для расчета прочностных и деформационных характеристик одно- и бимодальных зеренных структур.

Одномодальные зеренные структуры

3.1. Нанокристаллические структуры. На рис. 1, *а* приведены в координатах Холла-Петча (ХП) зависимости пределов текучести σ_y и прочности σ_u от величины зерен согласно выражениям (За) и (Зb) ($\beta_0 = 10^{-2}, \beta = 1$). При размерах нанозерен $d > d_b$ ($k_b < 1, mk_b \varepsilon_y \ll 1$) из этих выражений следуют нормальные соотношения ХП для σ_y и σ_u :

$$\sigma_y = K_y d^{-1/2},$$

$$K_y = m\alpha\mu b^{1/2} (\beta_0 + m\beta\varepsilon_y)^{1/2},$$

$$\sigma_u = K_u d^{-1/2}.$$
(6a)

$$K_u = m^{3/2} \alpha \mu (\beta b/2)^{1/2},$$
 (6b)

где K_y и K_u — соответствующие коэффициенты XП, такие что $K_u/K_y \approx (m\beta/2\beta_0)^{1/2} \gg 1$. В противоположном случае относительно малых размеров нанозерен $d \ll d_b$ $(k_b \gg 1, mk_b \varepsilon \gg 1)$ из выражений (3a) и (3b) следуют обратные соотношения XП [8]:

$$\sigma_y = K'_y d^{1/2}, \quad \sigma_u = K'_u d^{1/2},$$

 $K'_y \approx K'_u = m \alpha \mu (\beta b/d_b^2)^{1/2}.$ (6c)

Кривая на рис. 1, *b* иллюстрирует зависимость величины равномерной деформации от размера нанозерен согласно формуле (3c). Видно, что при $d > d_b$ ($k_b < 1$) нанометалл обладает достаточно большим запасом пластичности. Но по мере измельчения зерен и сближения значений пределов текучести и прочности (рис. 1, *a*) пластичность наноматериала сильно падает и обращается в нуль при $\sigma_u = \sigma_y$. Согласно выражению (3c), это имеет место при величине зерна

$$d_u = \frac{d_b}{(\beta/\beta_0 - 2/m)^{1/2}}.$$
 (7)

Так, при $\beta_0/\beta = 10^{-2}$ полная потеря наноматериалом пластичности наступает при размере зерна $d_u \approx (\beta_0/\beta)^{1/2} d_2 \approx 0.1 d_b$, т.е. близко к критической величине зерна d_c , когда на кривой $\sigma_y - d^{-1/2}$ на рис. 1, *а* наблюдается отклонение от нормального соотношения ХП.

В настоящее время нет достаточно полных и систематических данных по зависимости механических свойств нанометаллов от величины нанозерен, чтобы количественно сопоставить приведенные на рис. 1 зависимости для σ_u и ε_u с экспериментом. Это обстоятельство связано с тем, что методы получения металлов и сплавов с размерами зерен d < 100 nm, такие как консолидация нанопорошков и осаждение атомов на подложку из газовой фазы или раствора электролита, сопровождаются аккумуляцией примесей и пор в границах нанозерен. Это приводит к охрупчиванию нанометалла



Рис. 1. Зависимости предела текучести σ_y и прочности σ_u (*a*) и величины равномерной деформации (*b*) одномодальной зеренной структуры от размера нанозерен *d* в приведенных координатах Холла–Петча согласно соотношениям (3а)–(3с).

и его разрушению прежде, чем в нем возникает пластическая неустойчивость типа шейки [20]. В результате основной объем данных относится к начальной стадии деформации наноматериалов — к их микротвердости и пределу текучести [4,17,21]. Хорошее соответствие соотношений (3 а) и (6) экспериментальным данным по зависимостям пределов текучести ряда металлов от размера нанозерен (Cu, Ni, α-Fe, сплав Ni–W) продемонстрировано в [8,17].

3.2. Субмикро- и микрокристаллические структуры. Указанных выше недостатков лишен метод полученных ультрамелкозернистых металлов путем их предварительной интенсивной пластической деформации. Таким методом является, в частности, метод равноканального углового прессования (РКУП), позволяющий получать зерна в субмикрокристаллическом, $d > 0.1 \, \mu$ m, а после отжига деформированного материа-



Рис. 2. Зависимости предела текучести σ_y и предела прочности σ_u от размера зерен в микрокристаллическом алюминии [6].



Рис. 3. Зависимость величины равномерной деформации от размера зерен в алюминии технической чистоты при температурах 77 и 293 К [6]. *1*, 2 — расчет согласно соотношению (5 с) с учетом приведенных в табл. 1 значений параметров.

ла — и в микронном диапазонах. Для металлов с величиной зерен $d \ge 1\mu$ т зависимость предела текучести от d, согласно уравнению (5 а), с учетом того, что $mk_a\varepsilon_y \ll 1$ и $bk_f \approx 10^{-2}$, имеет вид нормального соотношения ХП:

$$\sigma_y = K_y^0 d^{-1/2}, \quad K_y^0 \approx m \alpha \mu (\beta_0 b)^{1/2},$$
 (8)

в то время как предел прочности σ_u микрокристаллического материала, согласно (5 b), не зависит от размера зерен.

Для иллюстрации этого на рис. 2 приведены данные [6] по зависимостям пределов текучести и прочности образцов A1 технической чистоты (99.3%) от *d* в координатах ХП при температуре 77 К. Образцы с различной величиной зерна от 0.35 до 45 µm были получены с помощью отжига после деформации методом РКУП. Из рис. 2 видно, что при размерах зерен $d > 1 \, \mu m$ и *d* < 1 µm пределы текучести микрокристаллических и субмикрокристаллических образцов подчиняются соотношению ХП (8), но с различной величиной коэффициентов XII, соответственно 70 и 120 MPa · μ m^{1/2}. Более высокое значение коэффициента ХП в субмикристаллическом материале может быть связано с более высокой величиной коэффициента β_0 , зависящего от степени эффективности границ зерен как источников начальной плотности дислокаций [8,18]. В субкристаллических образцах она должна быть выше, поскольку их отжиг осуществлялся при меньшей температуре и в течение менее длительного времени. Видно также, что в соответствии с выражением (5b) предел прочности σ_u не зависит от величины зерна, когда $d > 1 \, \mu$ т. В субмикрокристаллических образцах ($d < 1 \, \mu m$) пределы прочности и текучести практически совпадают и изменяются с размером зерна в соответствии с нормальным соотношением ХП.

Экспериментальные точки на рис. З показывают, как снижается величина равномерной деформации ε_u в Al по мере измельчения зерен при температурах опыта 77 и 293 К. Видно, что при достижении некоторого критического размера зерна $d_0 = 0.28 \,\mu m$ (77 K) и 1.18 μm (293 K) равномерная деформация обращается в нуль. Это означает, что локализация деформации наступает на самой ранней стадии деформации при $\sigma_u = \sigma_y$. Согласно (5c), деформация ε_u обращается в нуль при критическом размере зерна

$$d_0 = (1 + 2/mk_a)^2 d_a, (9)$$

где $d_a = \beta_0 k_a^2 b / (bk_f)^2$. Кривые *1* и *2* на рис. 3 построены в соответствии с соотношением (5с) при b = 0.286 nm, $bk_f = 10^{-2}$ и указанных в табл. 1 значениях других параметров.

Обращает на себя также внимание, что при 77 К значения равномерной деформации существенно больше, чем при 293 К. Это имеет место при размерах зерен $d > 1 \,\mu$ m и особенно при $d < 1 \,\mu$ m. При $d \gg d_a$ из соотношения (5 с) следует, что равномерная деформация не зависит от размера зерна и полностью определяется

Таблица 1. Значения параметров при расчете кривых *1* и *2* на рис. 3 согласно соотношению (5с)

Параметр	293 К кривая <i>1</i>	77 К кривая <i>2</i>
$lpha \ eta_0 \ k_a \ d_a, \ \mu \mathrm{m} \ d_0, \ \mu \mathrm{m}$	$0.5 \\ 2.5 \cdot 10^{-2} \\ 3.4 \\ 0.83 \\ 1.18$	$0.5 \\ 2.3 \cdot 10^{-2} \\ 1.4 \\ 0.13 \\ 0.28$

величиной коэффициента аннигиляции дислокаций k_a :

$$\varepsilon_u \approx \frac{2}{mk_a} \ln\left(1 + \frac{1}{2}mk_a\right).$$
 (10)

При снижении температуры коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций уменьшается [22], что, согласно соотношению (10), способствует росту величины равномерной деформации. Из приведенных в табл. 1 оценок коэффициента k_a видно, что при 77 К его значение меньше, чем при 293 К. Этим же обстоятельством объясняется, почему при 293 К полная потеря пластичности у А1 наступает при критическом размере зерна $d_0 = 1.18 \, \mu m$, а при 77 К — при меньшем его значении (0.28 µm). Из соотношения (9) видно, что $d_0 \sim d_a \sim \beta_0 k_a^2$, и, следовательно, критический размер зерна тем меньше, чем меньше коэффициент k_a и ниже температура. Другое обстоятельство, способствующее уменьшению критического размера зерна d_0 , — это степень эффективности границ зерен как источников дислокаций. Чем она выше, тем больше параметр β_0 [8] и, следовательно, критический размер зерна d_0 , когда субмикрокристаллический материал теряет пластичность.

4. Бимодальные зеренные структуры

Рис. 4 демонстрирует кривые деформации $\sigma - \varepsilon$ одномодальных (кривые 1 и 5) и бимодальных (кривые 2–4) зеренных структур, полученных включением в нанометалл (Al) с размером зерен 30 nm зерен микронного масштаба (10 μ m). Расчет кривых сделан в соответствии с правилом смеси

$$\sigma(\varepsilon, f) = (1 - f)\sigma^{(n)}(\varepsilon) + f\sigma^{(m)}(\varepsilon), \qquad (11)$$

где f — объемная доля зерен микронного размера, а $\sigma^{(n)}$ и $\sigma^{(m)}$ — напряжения течения одномодальных нано- и микрокристаллических структур согласно уравнениям (2) и (4). При расчете использовались значения параметров для микрокристаллического Аl, приведенные в табл. 1 (293 К), а для нанокристаллического алюминия — параметры $\beta_0 = 10^{-2}$ и $d_b = 200$ nm. На рис. 4 I — значения пределов прочности σ_u и величины равномерной деформации ε_u для анализируемых однои бимодальных зеренных структур. Они найдены путем подстановки напряжения (11) в критерий Консидера $d\sigma/d\varepsilon < \sigma$ и численного решения соответствующего уравнения для выбранных объемных долей f зерен микронного масштаба (f = 0.3, 0.6 и 0.8, кривые 2–4 соответственно). Видно, что эффект заметной пластификации наноструктуры при указанных условиях возникает при f > 0.6, но пластификация сопровождается существенным, в 3-4 раза, снижением предела прочности наномикристаллического композита.

На рис. 5 приведен еще один пример расчета кривых деформации бимодальной зеренной структуры. Такая структура возникает при отжиге деформированного



Рис. 4. Кривые деформации $\sigma - \varepsilon$ одномодальных (1, 5) и бимодальных (2-4) наномикрозеренных структур с различной объемной долей микрозерен f согласно (11) с учетом указанных в табл. 1 значений параметров. f: I - 0, 2 - 0.3, 3 - 0.6, 4 - 0.8, 5 - 1.0. I — расчет σ_u и ε_u согласно критерию Консидера.



Рис. 5. Кривые деформации $\sigma - \varepsilon$ одномодальных (1, 6) и бимодальных (2-5) наномикрозеренных структур с различной объемной долей микрозерен f согласно (12) с учетом указанных в табл. 2 значений параметров. f: 1 - 0, 2 - 0.1, 3 - 0.3, 4 - 0.6, 5 - 0.8, 6 - 1.0. I — расчет σ_u и ε_u согласно критерию Консидера.

РКУП-металла в результате неравномерной (незавершенной) его рекристаллизации [1]. Расчет кривых производился в соответствии с правилом смеси (11):

$$\sigma(\varepsilon, f) = (1 - f)\sigma^{(ms)}(\varepsilon) + f\sigma^{(m)}(\varepsilon), \qquad (12)$$

где вместо напряжения $\sigma^{(n)}$ фигурируют напряжения $\sigma^{(sm)}$ (4) с параметрами, отвечающими исходной до отжига одномодальной субмикрокристаллической зерен-

995

Таблица 2. Значения параметров при расчете кривых 1 и 6 на рис. 5 согласно соотношению (4)

Параметр	кривая 1	кривая 6
<i>d</i> , µm	0.1	10.0
eta_0	$1.2 \cdot 10^{-2}$	10^{-3}
k_a	4	4
d_a , μ m	0.12	0.01
$d_0, \ \mu \mathrm{m}$	0.16	0.014

ной структуре с размером зерен $d^{(sm)} = 0.1 \,\mu\text{m}$ (табл. 2, кривая *I*). В указанной таблице (кривая *6*) приведены также расчетные параметры для одномодальной рекристаллизованной микронной структуры с размером зерен $d = 10 \,\mu\text{m}$. Расчет кривых сделан применительно к данным [1] для меди ($b = 0.256 \,\text{nm}, \mu = 48 \,\text{GPa}, \alpha = 0.5, bk_f = 2 \cdot 10^{-2}$).

Из рис. 5 видно, что при указанных в табл. 2 значениях параметров деформация меди с субмикрокристаллической зеренной структурой (кривая *I*) осуществляется с самого начала с отрицательным коэффициентом деформационного упрочнения. Действительно, из уравнения (4) можно получить следующее соотношение для коэффициента деформационного упрочнения $\theta = d\sigma/d\varepsilon$:

$$\theta = \theta_2 \left[1 - \left(\frac{d_a}{d} \right)^{1/2} \right] \exp\left(-\frac{1}{2} m k_a \varepsilon \right).$$
(13)

Согласно (13), отрицательным коэффициентом θ становится при величине зерна $d < d_a$. При таких размерах зерен локализация деформации наступает на пределе текучести ультрамелкозернистого материала, что и наблюдается на опыте [1]. Из рис. 5 видно также, что по мере увеличения объемной доли f зерен микронного размера (кривые 2-5) коэффициент деформационного упрочнения наномикрозеренного композита становится все более положительным. Соответственно возрастает и величина равномерной деформации (I на рис. 5). Она определялась путем подстановки напряжения (12) в критерий Консидера и численного решения соответствующего уравнения при заданных значениях f. На рис. 6 показаны результаты этого решения для различных значений параметра β_0 .

В отличие от приведенных на рис. 4 результатов в рассматриваемом случае (рис. 5) рост пластичности бимодальной зеренной структуры не сопровождается существенным снижением характеристик ее прочности. При объемной доле зерен микронного размера f > 0.2предел прочности σ_u остается постоянным на уровне, определяемом соотношением (5 b). Он примерно на 25% ниже исходного, до отжига, предела текучести материала $\sigma_y \approx 400$ MPa, в то время как величина равномерной деформации ε_u с ростом f увеличивается в несколько раз. Именно такой эффект наблюдался в меди с бимодальной зеренной структурой при объемной доле микрозерен f = 0.25 [1]. Критическая концентрация зерен микронных размеров f_c , выше которой начинается пластификация наномикрозеренного композита (рис. 6), находится из условия $\sigma_y(f) = \sigma_u$, где, согласно (12), $\sigma_y = \sigma(0, f)$, а σ_u определяется соотношением (5b). На рис. 7 в качестве примера приведены зависимости $\sigma_y(f)$ для двух значений параметра β_0 (кривые I и 2). Пересечение их с горизонталью 3 на уровне σ_u определяет величину критической объемной доли микрозерен f_c :

$$f_c = \frac{\sigma_y^{(sm)} - \sigma_u}{\sigma_y^{(sm)} - \sigma_y^{(m)}} = \frac{1 - (d^{(sm)}/d_0^{(sm)})^{1/2}}{1 - (\beta_0^{(m)}d^{(sm)}/\beta_0^{(sm)}d)^{1/2}},$$
 (14)

где $d_0^{(sm)}$ — критический размер зерен (9), когда в одномодальной субмикрокристаллической структуре с



Рис. 6. Зависимость величины равномерной деформации ε_u бимодальной наномикрозеренной структуры от объемной доли микрозерен f при различных значениях параметра β_0 : $I - 10^{-3}$, $2 - 5 \cdot 10^{-3}$, $3 - 10^{-2}$, $4 - 5 \cdot 10^{-2}$.



Рис. 7. Зависимости предела текучести σ_y (1,2) и предела прочности σ_u (3) бимодальной наномикрозеренной структуры от объемной доли f зерен микронного размера при различных значениях параметра β_0 : $I - 10^{-2}$, $2 - 3 \cdot 10^{-2}$.

параметром эффективности границ зерен $\beta_0^{(sm)}$ величина равномерной деформации ε_u становится равной нулю; $\beta_0^{(m)}$ — аналогичный параметр для одномодальной микрозеренной структуры (табл. 2, кривая 6). Поскольку второе слагаемое в знаменателе выражений (14), как правило, существенно меньше единицы (например, для указанных в табл. 2 параметров оно равно $\approx 3 \cdot 10^{-2}$), критическое значение объемной доли зависит главным образом от соотношения размеров зерен $d_0^{(sm)}$ и $d^{(sm)}$.

Таким образом, сделанный выше анализ показывает, что заметное увеличение пластичности бимодальных наномикрозеренных структур при менее существенном снижении их прочности определяется рядом факторов. Главными из них являются соотношение размеров и объемных долей f нано- и микрозерен в бимодальной структуре, величина параметра β_0 , определяющая эффективность границ зерен как источников дислокаций, и коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций k_a. Последний зависит от температуры и величины энергии дефектов упаковки в металлах с ГЦК-решеткой или напряжения Пайерлса — в металлах с ОЦК-решеткой [22]. Найденные на основе уравнений дислокационной кинетики теоретические зависимости прочности и пластичности нанометаллов с бимодальной зеренной структурой от указанных факторов позволяют получать такие структуры с оптимальным сочетанием у них прочностных и пластических свойств.

Список литературы

- [1] Y. Wang, M. Chen, F. Zhou, E. Ma. Nature 419, 912 (2002).
- [2] C.C. Koch. Scripta Mater. 49, 657 (2003).
- [3] E. Ma. Scripta Mater. 49, 663 (2003).
- [4] S. Cheng, E. Ma, Y.M. Wang, L.J. Kecskes, K.M. Youssef, C.C. Koch, U.P. Trociewitz, K. Han. Acta Mater. 53, 1521 (2005).
- [5] N. Tsuji, Y. Ito, Y. Minamino. Scripta Mater. 47, 893 (2002).
- [6] C.Y. Yu, P.W. Kao, C.P. Chang. Acta Mater. 53, 4019 (2005).
- [7] J. Gil Sevillano, J. Aldzabal. Scripta Mater. 51, 795 (2004).
- [8] Г.А. Малыгин. ФТТ 49, 961 (2007).
- [9] D. Witkin, Z. Lee, R. Rodriguez, S. Nutt, E. Lavernia. Scripta Mater. 49, 297 (2003).
- [10] M.-Ch. Zhao, F. Yin, T. Hanamura, K. Nagai, A. Atrens. Scripta Mater. 57, 857 (2007).
- [11] S.X. Li, G.R. Cu. J. Appl. Phys. 101, 083 525 (2007).
- [12] В.А. Поздняков. Письма в ЖТФ 133, 36 (2007).
- [13] H. Conrad. Acta Mater. 11, 75 (1963).
- [14] M.F. Ashby. Phil. Mag. A 21, 399 (1971).
- [15] U.F. Kocks, H. Mecking. Progr. Mater. Sci. 48, 171 (2003).
- [16] Г.А. Малыгин. ФТТ **35**, 1609 (1993).
- [17] Г.А. Малыгин. ФТТ 49, 2161 (2007).
- [18] J.M.C. Li. Trans. Metal. Society of AIME 227, 239 (1963).
- [19] Р. Бернер, Г. Кронмюллер. Пластическая деформация монокристаллов. Мир, М. (1969). 264 с.
- [20] Kh. Youssef, R.O. Scattergood, K.L. Murty, J.A. Horton, C.C. Koch. Appl. Phys. Lett. 87, 091 904 (2005).
- [21] R.J. Asaro, S. Suresh. Acta Mater. 53, 3369 (2005).
- [22] Г.А. Малыгин. ФТТ 47, 236 (2005).