

Анализ скоростной чувствительности напряжений течения нанокристаллических металлов с ГЦК- и ОЦК-решетками

© 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 12 апреля 2007 г.)

В рамках дислокационно-кинетического подхода, учитывающего свойства границ зерен как источников, стоков и барьеров для движущихся дислокаций, количественно проанализирована зависимость коэффициента скоростной чувствительности напряжений течения $S = d \ln \sigma / d \ln \dot{\epsilon}$ в нанокристаллических (НК) металлах от температуры, скорости деформации и размера нанозерен. Сделан вывод, что на порядок более высокое по сравнению с крупнозернистыми металлами значение этого коэффициента у НК-металлов с ГЦК-решеткой (Cu, Ni) и сильная зависимость коэффициента S от указанных выше факторов связаны с взаимодействием движущихся дислокаций с лесом дислокаций в границах нанозерен. Существенный вклад в эту зависимость вносит аннигиляция решеточных дислокаций в границах, контролируемая энергией активации зернограничной диффузии. У НК-металлов с ОЦК-решеткой (α -Fe) на порядок более низкие по сравнению с крупнозернистыми образцами значения коэффициента S обусловлены наличием рельефа Пайерлса для дислокаций, движущихся внутри нанозерен.

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

В литературе в течение десятилетия идет дискуссия [1–6] относительно физического механизма деформации нанокристаллических (НК) материалов (главным образом металлических, величина зерна $d < 100$ nm) и вклада дислокаций в пластичность и прочность этих материалов при размерах кристаллитов меньше 10–20 nm. В пользу недислокационного характера их деформации при указанных размерах зерен имеется ряд аргументов как экспериментального, так и теоретического плана. Одним из них является неспособность при наблюдаемых в эксперименте напряжениях действия дислокационных источников Франка–Рида, когда размер зерен $d < 10$ nm. Второй аргумент — это невозможность образования в таких зернах скоплений дислокаций, необходимых для активизации согласно эстафетному механизму возникновения соотношения Холла–Петча $\sigma_y \sim d^{-1/2}$ дислокационных источников в соседних зернах, где σ_y — предел текучести поликристаллического материала. До недавнего времени преобладала точка зрения, что дислокации не вносят вклада в деформацию наноматериалов, когда размер кристаллитов меньше 10–15 nm, а основным механизмом деформации является проскальзывание по границам зерен, контролируемое зернограничной диффузией (например, механизм ползучести Кобла) [1,2]. Альтернативным является механизм бездиффузионного и безактивационного проскальзывания зерен (механизм шаффлинга (shuffling) атомов [2,7]).

В настоящее время появляется все больше экспериментальных данных и теоретических аргументов в пользу того, что дислокации вносят вклад в деформацию наноматериалов во всем диапазоне размеров зерен $d < 100$ nm. Так, эксперименты по пластическому деформированию НК-Ni [8], Cu [9] и Al [10], полученных моделированием их поликристаллической

структуры методом молекулярной динамики, показали, что при размерах кристаллитов 5–15 nm наблюдается прохождение через объем зерен частичных и полных дислокаций. Дислокации и их генерацию из границ нанозерен наблюдали непосредственно методом высокоразрешающей трансмиссионной электронной микроскопии (HRTEM) [11–13]. Сделанная в ходе этого исследования оценка плотности дислокаций показала высокое ее значение ($10^{15} - 10^{16} \text{ m}^{-2}$) в НК-меди [12].

Эффективным методом анализа физического механизма пластической деформации кристаллических тел является термоактивационный анализ. Его применение к проблеме определения механизма деформации НК-материалов показало [14–18], что результаты анализа могут быть интерпретированы в пользу дислокационного механизма деформации наноматериалов. С точки зрения дислокационного механизма получила качественное объяснение повышенная по сравнению с крупнозернистыми образцами чувствительность напряжений течения σ НК-металлов с ГЦК-структурой [14–18] к изменению скорости деформации $\dot{\epsilon}$ и, наоборот, пониженная чувствительность к этому изменению НК-металлов с ОЦК-решеткой [14].

Целью настоящей работы является количественный анализ механизма деформации наноматериалов в рамках дислокационно-кинетического подхода [6,19] к проблеме прочности и пластичности микро- и нанокристаллических материалов и сплавов, позволяющего установить зависимость их основных деформационных и прочностных свойств от температуры T , скорости деформации $\dot{\epsilon}$ и структурных факторов, в данном случае — от размера нанозерен d . В первом разделе приведены основные теоретические соотношения дислокационно-кинетического подхода, необходимые для количе-

ственного анализа скоростной чувствительности (СЧ) напряжений течения в НК-металлах. Во втором разделе эффективность этих соотношений продемонстрирована на примере анализа коэффициента СЧ напряжений течения $S = d \ln \sigma / d \ln \dot{\varepsilon}$ в НК-металлах с ГЦК- и ОЦК-решетками.

1. Основные соотношения

Дислокационно-кинетический подход к проблеме деформации наноматериалов предполагает [6,19], что наличие у НК-металлов деформационного упрочнения [17,20], как и в случае более крупнозернистых образцов, обусловлено взаимодействием дислокаций друг с другом. Оно описывается известным соотношением Тейлора для напряжения течения $\tau = \tau_f + \alpha \mu b \rho^{1/2}$, где ρ — плотность дислокаций, α — постоянная взаимодействия дислокаций, τ_f — напряжение трения при взаимодействии дислокаций с примесными атомами и рельефом Пайерлса (в ОЦК-металлах), b — вектор Бюргерса, μ — модуль сдвига. Плотность дислокаций в НК-материале изменяется с деформацией сдвига γ в соответствии с кинетическим уравнением [6,19]

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{\beta}{bd} - (k_a + k_b)\rho, \quad k_b = 4\eta_b \frac{D_{gb}}{m\dot{\varepsilon}d^2}. \quad (1)$$

Здесь β — коэффициент, определяющий интенсивность накопления дислокаций в объеме зерен вследствие ограничения длины свободного пробега дислокаций размером зерна ($\beta \approx 1$ [21]) или вследствие несовместимости пластических деформаций зерен ($\beta = 1/4$ [22]), k_a — коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций механизмом поперечного скольжения, k_b — коэффициент аннигиляции краевых дислокаций, аккумулированных в границах нанозерен, $D_{gb} = D_{gb}(T)$ — коэффициент зернограницной диффузии, T — температура, $\eta_b \approx \mu b^3 / k_B T$, k_B — постоянная Больцмана, $\dot{\varepsilon} = \dot{\gamma} / m$ и $\dot{\gamma}$ — относительные скорости соответственно деформации растяжения и сдвиговой деформации, $m = 3.05$ — ориентационный фактор Тейлора. Интегрируя уравнение (1), получаем зависимость плотности дислокаций в наноматериале от величины одноосной деформации растяжения (сжатия) $\varepsilon = \gamma / m$

$$\rho(\varepsilon) = \rho_0 \exp(-mk\varepsilon) + \rho_m [1 - \exp(-mk\varepsilon)], \quad (2)$$

где $\rho_0 = \beta_0 / bd$ — начальная ($\varepsilon = 0$) плотность дислокаций вследствие их генерирования из границ зерен [6,23], β_0 — коэффициент, зависящий от плотности ступенек (ledges) в границах, $k = k_a + k_b$, $\rho_m = \beta / bdk$ — равновесная плотность дислокаций при $\varepsilon \rightarrow \infty$. С учетом (2) и соотношения Тейлора $\tau \sim \rho^{1/2}$ зависимость напряжения течения НК-материала $\sigma = m\tau$ от деформации ε описывается при $\tau_f = 0$ выражением

$$\sigma(\varepsilon) = m\alpha\mu b \left\{ \rho_0 \exp(-mk\varepsilon) + \rho_m [1 - \exp(-mk\varepsilon)] \right\}^{1/2}, \quad (3)$$

где, согласно (1), $k = k_a + k_b(T, \dot{\varepsilon}, d)$. Поскольку $\rho_0 \sim \rho_m \sim d^{-1}$, то уравнению (3) можно придать вид

$$\sigma(\varepsilon) = m\alpha\mu \left(\frac{b}{d} \right)^{1/2} \times \left[\beta_0 \exp(-mk\varepsilon) + \frac{\beta}{k} [1 - \exp(-mk\varepsilon)] \right]^{1/2}. \quad (4)$$

Результаты электронно-микроскопических исследований [11–13] и компьютерного моделирования [8–10,24] пластической деформации НК-металлов показывают, что границы зерен являются: 1) источниками дислокаций, 2) барьерами, способствующими накоплению дислокаций внутри нанозерен и 3) стоками для дислокаций. Именно эти кинетические процессы учитывают уравнения (1) и (2) для плотности дислокаций и уравнения (3) и (4) для напряжения течения. Параметры β_0 и β определяют интенсивность первых двух кинетических процессов, в то время как коэффициент аннигиляции дислокаций k_b , зависящий от размера зерен, температуры и скорости деформации, контролирует емкость границ зерен как стоков для решеточных дислокаций. Эксперименты [12] и результаты компьютерного моделирования [24] подтверждают, что плотность дислокаций внутри нанозерен и напряжения течения НК-металлов [20,24] тем меньше, чем меньше размер зерна, выше температура и ниже скорость деформации, т.е. больше, согласно (1), коэффициент аннигиляции дислокаций k_b .

Для проверки соответствия напряжения (4) эксперименту на рис. 1,а приведена зависимость микротвердости H НК-сплава Ni–W [25] от размера зерна в координатах Холла–Петча (Х–П) $H \sim d^{-1/2}$. Видно, что при размерах нанозерен $d > 20$ nm микротвердость изменяется в соответствии с нормальным соотношением Х–П $H \sim d^{-1/2}$, но при меньших их размерах наблюдается отклонение от этого соотношения тем сильнее, чем меньше величина нанозерен. При $d < 7.2$ nm имеет место обратное (inverse) соотношение Х–П, когда микротвердость не увеличивается, а снижается по мере измельчения зерен вплоть до их размера 2 nm (две крайние точки в правой части рис. 1,а). Сплошная кривая на рисунке проведена согласно уравнению (4) в предположении, что $H = 3\sigma_y$, где $\sigma_y = \sigma(\varepsilon_y)$ — напряжение, соответствующее величине пластической деформации $\varepsilon_y = 0.2\%$, при которой на практике определяют предел текучести поликристаллических, в том числе и НК-материалов. Согласие теории и эксперимента найдено при следующих значениях параметров уравнения (4): $b = 0.249$ nm, $\mu = 75$ GPa, $\alpha = 0.7$, $\beta_0 = 6 \cdot 10^{-3}$, $\beta = 1$, $k_a = 0$, $k = k_b = (d_b/d)^2$, где, согласно (1), $d_b = (4\eta_b D_{gb}/m\dot{\varepsilon})^{1/2} = 80$ nm. При $T = 293$ K, $\dot{\varepsilon} = 10^{-4}$ s⁻¹, $\eta_b = 290$ указанной величине параметра d_b соответствует коэффициент зернограницной диффузии $D_{gb} = D_{gb}^0 \exp(-U_{gb}/k_B T) = 1.6 \cdot 10^{-17}$ cm²·s⁻¹. Такое его значение может быть получено при разумном

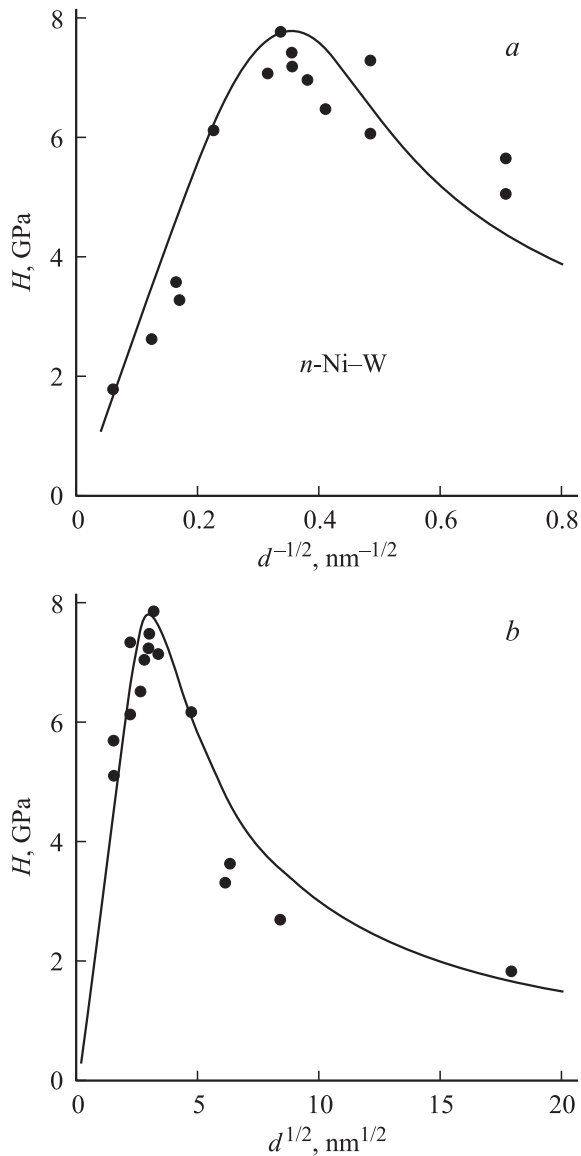


Рис. 1. Зависимость микротвердости НК-сплава Ni–W от размера зерна в обычных (a) и обратных (b) координатах Холла–Петча. Экспериментальные точки — данные [25], кривые построены согласно уравнению (4).

значении энергии активации зернограницной диффузии в НК-Ni $U_{gb} = 1 \text{ eV}$ [26] и $D_{gb}^0 = 4 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

Восходящий участок кривой на рис. 1, a показывает эффект зернограницного упрочнения сплава Ni–W, когда размер нанозерен $d > 15\text{--}20 \text{ nm}$. Для коэффициента Х–П $K_{H-P} = d\sigma_y/d(d^{-1/2})$, согласно (4), имеем соотношение

$$K_{H-P} \approx m\alpha\mu(b)^{1/2}(\beta_0 + \beta m\epsilon_y)^{1/2} \approx 8.66 \text{ GPa} \cdot \text{nm}^{1/2}. \quad (5)$$

Падающий участок кривой на этом рисунке иллюстрирует эффект зернограницного разупрочнения сплава вследствие аннигиляции краевых дислокаций в границах нанозерен. При $d < 7 \text{ nm}$ и $k_a = 0$ получаем в этом

случае при $k_b \gg 1/m\epsilon_y$ следующую зависимость предела текучести σ_y от размера зерна:

$$\sigma_y = m\alpha\mu\left(\frac{\beta b}{d_b^2}\right)^{1/2} d^{1/2} \sim d^{1/2}. \quad (6)$$

Выражение (6) представляет собой обратное соотношение Х–П. Для подтверждения соотношения (6) на рис. 1, b экспериментальные и теоретические результаты рис. 1, a приведены в обратных координатах Х–П $H-d^{1/2}$. Следует отметить, что выражение (6) получено в предположении, что внутри нанозерен и в их границах не происходит аннигиляции винтовых дислокаций поперечным скольжением ($k_a = 0$) ввиду отсутствия для этого необходимого пространства. Максимуму кривых на рис. 1 соответствует размер нанозерен $d_c = 7.2 \text{ nm}$ и величина коэффициента аннигиляции дислокаций $k_b = (d_b/d_c)^2$. При $d_b = 80 \text{ nm}$ получаем оценку $k_b \approx 120$.

2. Коэффициент СЧ напряжений течения

Традиционный термоактивационный анализ пластической деформации кристаллов предполагает, что при своем движении по плоскостям скольжения дислокации встречают препятствия с коротким радиусом действия типа примесных атомов, дислокаций леса или барьеров Пайерлса, которые они преодолевают с помощью термических флуктуаций. О типе и характере этих барьеров судят по величине экспериментально определяемых значений скоростной $(\partial\tau/\partial \ln \dot{\epsilon})_T = k_B T/V$ и температурной $(\partial\tau/T)_\dot{\epsilon} = (k_B \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon}))/V$ чувствительностей напряжений течения, где $\dot{\epsilon}_0$ — предэкспоненциальный фактор в выражении Аррениуса для скорости пластической деформации, $V = d\Delta x l$ — активационный объем, $\Delta x \approx b$ — энергетическая ширина препятствий, l — расстояние между ними в плоскости скольжения. Именно расстояние между препятствиями позволяет, как правило, идентифицировать тип барьеров, с которыми дислокации взаимодействуют при своем движении. Об этом можно судить также по величине коэффициента СЧ напряжений течения $S = (\partial \ln \tau / \partial \ln \dot{\epsilon})_T = k_B T/V\tau$. Далее с помощью приведенных в разделе (1) соотношений количественно проанализированы имеющиеся данные по величине этого коэффициента в НК-металлах с ГЦК- и ОЦК-решетками [14–18].

2.1. Металлы с ГЦК-решеткой. В достаточно крупнозернистых ГЦК-металлах в отсутствие примесей основными препятствиями для движения дислокаций являются дислокации леса в границах дислокационных ячеек внутри зерен. Принимая во внимание, что активационный объем в этом случае равен $V_d = b\Delta x l_d$, где $l_d = \rho^{-1/2}$ — расстояние между дислокациями леса, а напряжение течения $\tau = \alpha\mu b\rho^{1/2}$, получаем, что коэффициент СЧ $S = S_d = k_B T/\alpha\mu b^2\Delta x$ не зависит ни

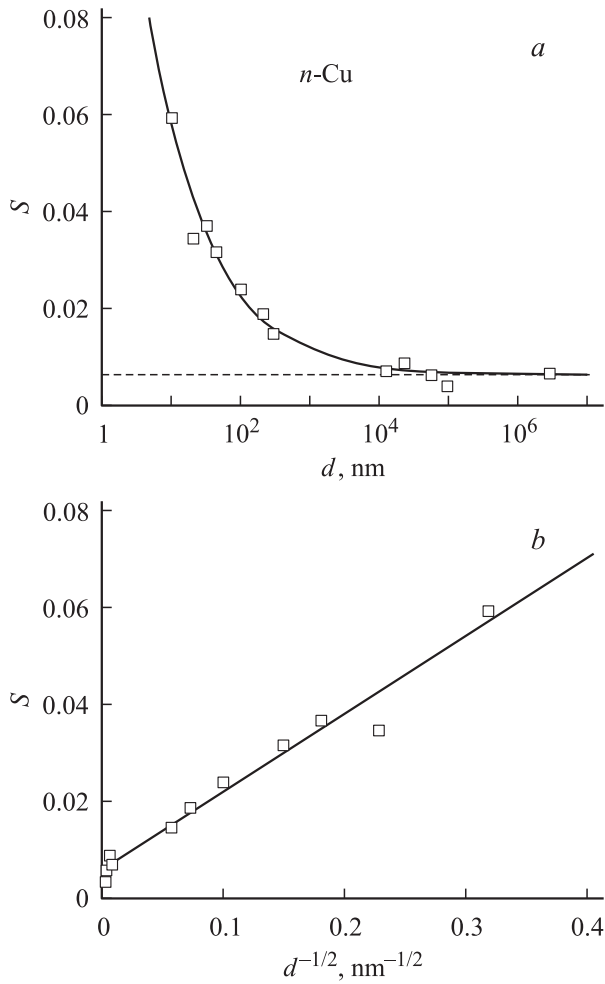


Рис. 2. Зависимость коэффициента СЧ предела текучести S меди от размера зерна в координатах $S - \lg d$ (а) и $S - d^{-1/2}$ (б). Экспериментальные точки — данные [18], кривые — расчет согласно уравнению (8).

от плотности дислокаций, ни от размера зерен. В НК-материале с ГЦК-решеткой дислокации леса внутри нанозерен отсутствуют, поскольку эмитируемые из границы зерна дислокации после перемещения по телу исчезают в противоположной его границе [10,24]. Следовательно, барьеры с коротким радиусом действия могут находиться только в границах нанозерен [14–18]. Ими могут быть, например, ступеньки атомных размеров, образовавшиеся при поглощении или испускании границами дислокаций. Здесь возможны две ситуации. 1) Дислокации, перемещаясь по плоскости скольжения внутри зерна, упираются своими концами в его границы [10,24]. Ступеньки на границах можно рассматривать в этом случае как зернограницный лес дислокаций. Действующая на ступеньки сила равна $bl_g\tau$, где $l_b = \xi d$, $\xi \leq 1$ — коэффициент, зависящий от изгиба дислокации в плоскости скольжения. Активационный объем V_g при этом равен $b\Delta x l_g$. 2) Можно предполагать также [17], что эмиссия дислокаций из границ является термо-

активированным процессом, а длина дислокационных источников в границах l_g пропорциональна размеру зерна, $l_g = \xi d$, но заметно меньше его, так что $\xi < 0.5$ в зависимости от формы зерна. Величину параметра ξ и, следовательно, тип препятствий и механизм термоактивационного взаимодействия дислокаций с ними можно установить, анализируя зависимость коэффициента СЧ напряжений S от размера зерен.

Рис. 2, а демонстрирует зависимость $S(d)$ для предела текучести поликристаллической меди при 293 К и варьировании размера кристаллитов в широком диапазоне [18]. Видно, что измельчение зерен приводит к существенному росту коэффициента S . Так, в крупнозернистой меди $S = S_d = 6.4 \cdot 10^{-3}$ (штриховая линия), а в нанозернистой — на порядок больше. При наличии леса дислокаций внутри зерен и в их границах для эффективного расстояния l между препятствиями имеем соотношение $l^{-1} = l_d^{-1} + l_g^{-1}$ и, следовательно, $V = d\Delta x l = b\Delta x(\rho^{1/2} + 1/\xi d)^{-1}$. Подставляя активационный объем V и напряжение $\tau = \alpha\mu b\rho^{1/2}$ в соотношение $S = k_B T/V\tau$, получаем зависимость коэффициента S от размера зерна и плотности дислокаций

$$S = S_d(1 + 1/\xi d\rho^{1/2}), \quad (7a)$$

где S_d — введенный ранее коэффициент СЧ напряжений течения в крупнозернистом материале. Далее, принимая во внимание (2) и (4), находим зависимость коэффициента S от степени пластической деформации

$$S(\varepsilon, d) = S_d \left[1 + \frac{1}{\xi\chi(\varepsilon)} \left(\frac{b}{d} \right)^{1/2} \right], \quad (7b)$$

где

$$\chi(\varepsilon) = \left[\beta_0 \exp(-mk_b\varepsilon) + \frac{\beta}{k_b} (1 - \exp(-mk_b\varepsilon)) \right]^{1/2}. \quad (7c)$$

На пределе текучести выполняется равенство $\chi(\varepsilon_y) = \chi_y \approx (\beta_0 + \beta m\varepsilon_y)^{1/2}$ при условии, что $mk_b\varepsilon_y \ll 1$; и для коэффициента СЧ получаем соотношение

$$S(d) = S_d \left[1 + \frac{1}{\xi\chi_y} \left(\frac{b}{d} \right)^{1/2} \right] \sim d^{-1/2}. \quad (8)$$

На рис. 2, б показана зависимость этого коэффициента (рис. 2, а) от размера зерна в координатах $S - d^{-1/2}$ (см. также [6,15]). Видно, что наблюдается хорошее соответствие между соотношением (8) и экспериментом. При $S_d = k_B T/\alpha\mu b^2\Delta x = 6.4 \cdot 10^{-3}$ по наклону прямой на рис. 2, б находим, что комбинация параметров $\xi\chi_y$ равна $1.2 \cdot 10^{-2}$. Указанной величине коэффициента S_d для меди при $\Delta x \approx b$ соответствует величина постоянной взаимодействия дислокаций $\alpha = 0.78$. Чтобы оценить величину параметра ξ , необходимо иметь независимую оценку параметра χ_y . Она может быть найдена из соотношения X–П для предела текучести НК-меди. Согласно приведенным в [15,18] данным, коэффициент X–П в меди равен $3.66 \text{ GPa} \cdot \text{nm}^{1/2}$. С учетом

Величины параметров в соотношениях (5) и (7) для НК-меди и никеля

Параметр	Cu	Ni
$K_{H-P}, \text{GPa} \cdot \text{nm}^{1/2}$	3.66	4.0
α	0.78	0.86
$\xi\chi_y$	$1.2 \cdot 10^{-2}$	$3.2 \cdot 10^{-2}$
χ_y	$6.5 \cdot 10^{-2}$	$4.1 \cdot 10^{-2}$
ξ	0.18	0.78

того, что $K_{H-P} = \alpha\mu(b)^{1/2}\chi_y$ (см. (5)), получаем при $\alpha = 0.78$, $b = 0.256 \text{ nm}$ и $\mu = 48 \text{ GPa}$ оценки параметров χ_y и ξ для меди, равные соответственно $6.5 \cdot 10^{-2}$ и 0.18. Найденное значение ξ с учетом сказанного выше больше соответствует механизму термоактивированной эмиссии дислокаций из границ зерен. Аналогичная процедура, проделанная с приведенными в [6,15,16] данными для никеля, дает оценку параметра ξ , равную ≈ 0.78 (оценки остальных параметров для Ni приведены в таблице наряду с их оценками для Cu). Таким образом, для никеля параметр ξ больше соответствует механизму термоактивированного преодоления движущейся дислокацией дислокаций леса в границах нанозерен.

Согласно приведенным выше соотношениям, температурная зависимость коэффициента S при размерах нанозерен, когда имеет место нормальный эффект Х–П, целиком определяется коэффициентом $S_d \sim T$. На рис. 3 кривая 1 для крупнокристаллического Ni [17] подтверждает линейный характер зависимости коэффициента S_d от T в широком интервале температур. Светлые квадраты на это рисунке демонстрируют температурную зависимость коэффициента S для НК-Ni с размером зерна 29 nm. Видно, что при температурах выше 293 K этот коэффициент резко возрастает с повышением температуры и существенно превосходит коэффициента S_d для крупнокристаллического никеля.

Есть основания считать, что этот рост связан с диффузионными процессами, развивающимися в границах нанозерен. Кривая 2 на рис. 3 демонстрирует результат расчета коэффициента S для НК-Ni согласно соотношениям (7b) и (7c) при $\epsilon_y = 10^{-2}$, $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, $\beta_0 = 10^{-3}$ и энергии активации зернограницной диффузии $U_{gb} = 1.0 \text{ eV}$ с учетом зависимости коэффициента аннигиляции дислокаций k_b от скорости деформации, температуры и размера зерна (1). Видно, что результаты расчета качественно правильно отражают характер изменения коэффициента S с температурой в НК-никеле.

Другой путь расчета коэффициента S основан на прямом дифференцировании по $\dot{\epsilon}$ соотношения Тейлора для напряжения течения $\tau = \alpha\mu b\rho^{1/2}$. Принимая во внимание, что $\alpha = \alpha(T, \dot{\epsilon})$ и $\rho = \rho(T, \dot{\epsilon}, d)$, получаем

$$S(T, \dot{\epsilon}) = \frac{d(\ln \alpha)}{d \ln \dot{\epsilon}} + \frac{1}{2} \frac{d(\ln \rho)}{d \ln \dot{\epsilon}}, \quad (9)$$

где $\alpha(T, \dot{\epsilon}) = \alpha_\mu + \alpha_*$, α_μ и $\alpha_* = (U_{gb} - k_B T \times \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon}))/\mu b^2 \Delta x$ — соответственно атермическая и

термическая составляющие постоянной взаимодействия движущихся дислокаций с лесом дислокаций в объеме и границах нанозерен. Линейный характер зависимости постоянной α от температуры согласуется с результатами термоактивационного анализа механизма деформации нанокристаллического никеля [17]. В указанной работе установлено, что энергия активации деформации НК-Ni линейно зависит от напряжения, $U = U_0 - V\tau_*$, где τ_* — термическая компонента напряжений течения, $V = (10-12)b^3$, $U_0 = 1.1 \text{ eV}$. Идентификация $U_0 = U_{gb} \approx 1 \text{ eV}$ означает, что механизм деформации НК-никеля состоит в волочении порогов (дислокационных узлов) на движущихся дислокациях, образовавшихся в результате их взаимодействия с дислокациями в границах нанозерен. Этот процесс осложнен тем, что одновременно с процессом волочения порогов протекает аннигиляция зернограницных дислокаций, дающая дополнительный и существенный вклад в коэффициент скоростной чувствительности напряжений течения. Принимая во внимание, что $d(\ln \alpha)/d \ln \dot{\epsilon} = S_d$, а

$$d(\ln \rho)/d \ln \dot{\epsilon} = [-d(\ln k_b)/d \ln \dot{\epsilon}]P(T, \dot{\epsilon}),$$

где, согласно (1), $d(\ln k_b)/d \ln \dot{\epsilon} = -1$, получаем после подстановки этих соотношений в уравнение (9) зависимость коэффициента S от T и $\dot{\epsilon}$

$$S(T, \dot{\epsilon}) = S_d(T, \dot{\epsilon}) + \frac{1}{2} P(T, \dot{\epsilon}). \quad (10a)$$

Здесь $P(T, \dot{\epsilon})$ — функция, изменяющаяся от 0 до 1 при изменении коэффициента аннигиляции дислокаций

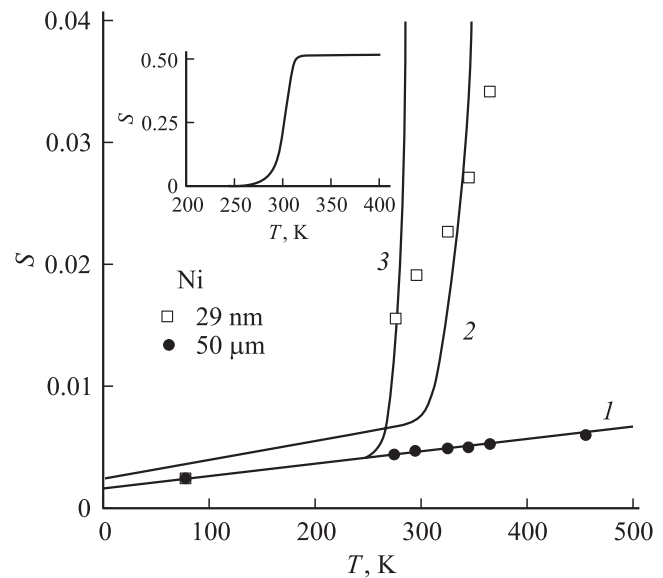


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициентов СЧ напряжений течения в крупно- и нанокристаллическом Ni. Экспериментальные точки — данные [17], кривые 1, 2 и 3 (а также кривая на вставке) построены согласно уравнениям (8), (7) и (10) соответственно.

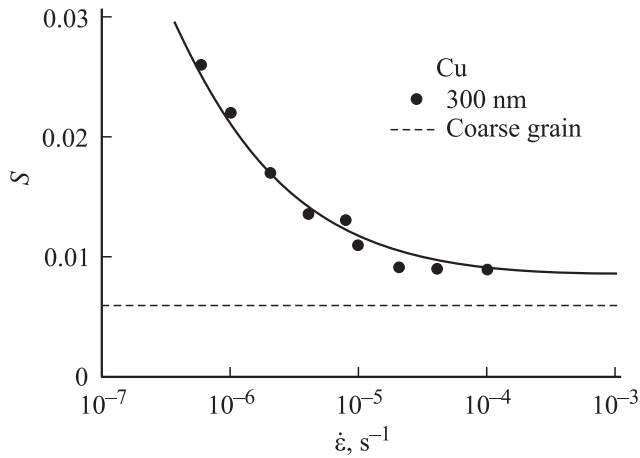


Рис. 4. Зависимости от скорости деформации коэффициентов СЧ напряжений течения в нано- и крупнокристаллической (штриховая линия) меди. Экспериментальные точки — данные [27], сплошная кривая — расчет согласно уравнениям (7).

$k_b(T, \dot{\epsilon})$ от 0 до $k_b \gg 1/m\epsilon_y$,

$$P(T, \dot{\epsilon}) = \frac{(\beta_0 k_b - \beta) m k_b \dot{\epsilon} + \beta (\exp(m k_b \dot{\epsilon}) - 1)}{\beta_0 k_b + \beta (\exp(m k_b \dot{\epsilon}) - 1)}. \quad (10b)$$

Кривая 3 рассчитана согласно соотношениям (10). Видно, что аннигиляция дислокаций в границах существенно увеличивает коэффициент S . На вставке к рис. 3 приведена его полная зависимость от температуры. При $T > 320$ К величина коэффициента достигает предельного значения $S = 0.5$, характерного для сверхпластической деформации микро- и нанокристаллических материалов.

Из соотношений (10) следует, что коэффициент S зависит также от скорости деформации $\dot{\epsilon}$. В литературе нет экспериментальных данных относительно зависимости $S(\dot{\epsilon})$ в НК-Ni. На рис. 4 эта зависимость приведена для меди с размером зерна 300 nm [27]. Сплошная кривая на рисунке — результат расчета коэффициента S согласно соотношениям (7b), (7c) и выражению (1) для коэффициента $k_b = k_b(\dot{\epsilon}) \sim \dot{\epsilon}^{-1}$. При расчете использовались следующие значения параметров и переменных: $T = 293$ К, $S_d = 7.5 \cdot 10^{-3}$, $U_{gb} = 0.85$ эВ, $D_{gb}^0 = 4$ см²·с⁻¹, $\beta_0 = 10^{-3}$, $\beta = 1$, $\epsilon_y = 10^{-2}$, $\xi = 1$. Из уравнения (7c) при $m k_b \dot{\epsilon}_y \gg 1$ следует, что $\chi(\epsilon_y) = \chi_y \approx (\beta/k_b)^{1/2}$. Подставляя χ_y в формулу (8) получаем, что $S(\dot{\epsilon}) - S_d \sim (k_b(\dot{\epsilon}))^{1/2} \sim \dot{\epsilon}^{-1/2}$. Обработка данных рис. 4 в соответствии с этим законом показала, что они хорошо с ним согласуются. Значение параметра $\xi = 1$ для субмикронной меди, необходимое для согласования теоретических и экспериментальных результатов на рис. 4, заметно превышает найденную выше оценку этого параметра для НК-меди $\xi = 0.18$.

В заключении подраздела сделаем краткое замечание относительно температурной чувствительности напряжений течения $S_T = d\tau/dT$ в НК-металлах с ГЦК-струк-

турой. При термоактивированном механизме деформации

$$S_T = \frac{k_B}{V} \ln \frac{\dot{\epsilon}_0}{\dot{\epsilon}}, \quad (11)$$

где, как показано выше, $V = b\Delta x(\rho^{1/2} + 1/\xi d)^{-1}$. В НК-металле при $\xi d \rho^{1/2} \ll 1$ получаем, что $S_T \sim d^{-1}$, т.е. чем меньше размер зерен, тем выше температурная чувствительность напряжений течения. Этот вывод хорошо подтверждается экспериментом [28].

2.2. Металлы с ОЦК-решеткой. НК-металлы с ОЦК-структурой по сравнению с ГЦК-металлами менее исследованы на предмет СЧ их напряжений течения. На рис. 5 экспериментальные точки показывают, как изменяется величина коэффициента S на пределе текучести α -Fe при варьировании величины зерен в широком диапазоне от 10 nm до 30 μ m [14]. Видно, что вплоть до 20 nm коэффициент СЧ в отличие от ГЦК-металлов снижается по мере измельчения кристаллитов, но при $d < 20$ nm имеет тенденцию к росту.

В отличие от чистых ГЦК-металлов, где единственными препятствиями с коротким радиусом являются дислокации леса, в металлах с ОЦК-структурой при температурах $T < 0.15T_m$ (T_m — температура плавления) большой вклад в торможение винтовых дислокаций вносит решеточный рельеф Пайерлса. В результате этого напряжение течения включает помимо зернограничной компоненты (4) еще и напряжение Пайерлса $\sigma_p = m\tau_p$. Для эффективных активационного расстояния l и активационного объема V с учетом всех препятствий, включая лес дислокаций в границах нанозерен, имеем соответственно соотношения $l^{-1} = l_p^{-1} + l_g^{-1} + l_d^{-1}$ и $V = b^2 l$, где, согласно модели мягких перегибов Дорна–Раньака [29,30], для α -Fe при 293 К ($0.16T_m$) $l_p \approx 30b$ [30], а $l_d = \rho^{-1/2}$ и $l_g = \xi d$. Подставляя напря-

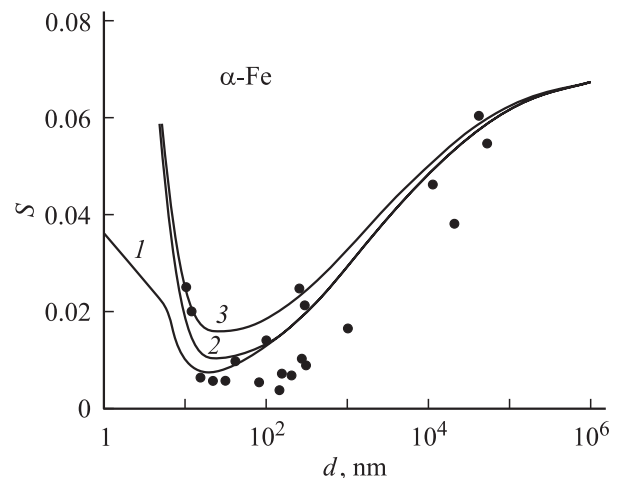


Рис. 5. Зависимость от размера зерна коэффициента СЧ предела текучести α -Fe. Экспериментальные точки — данные [14]. Кривые 1–3 — расчет согласно формулам (12) и (13): 1 — без учета леса дислокаций в границах и объеме зерен, 2 и 3 — с учетом леса дислокаций соответственно в границах и объеме зерен.

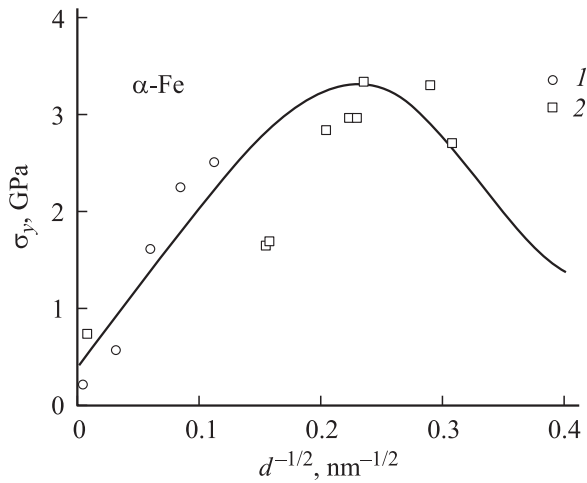


Рис. 6. Зависимость предела текучести α -Fe от размера зерна. Экспериментальные точки: 1 — данные [31], 2 — [32]. Кривая — расчет согласно уравнению (13).

жение и объем V в соотношение для коэффициента S , получаем после некоторых преобразований зависимость этого коэффициента от величины зерна и степени деформации

$$S(d, \varepsilon) = \left(\frac{k_B T}{\mu b^2 l_p} \right) \frac{1 + \frac{l_p}{\xi d} + \frac{l_p}{b} \left(\frac{b}{d} \right)^{1/2} \chi(\varepsilon, d)}{\frac{\tau_p}{\mu} + \alpha \left(\frac{b}{d} \right)^{1/2} \chi(\varepsilon, d)}. \quad (12)$$

Для количественного расчета коэффициента S согласно уравнению (12) необходимо иметь оценки его параметров. Их можно получить, анализируя зависимость предела текучести α -железа σ_y от размера зерна. На рис. 6 экспериментальные точки 1 иллюстрируют эту зависимость при варьировании размера зерна от 80 nm до 20 μm [31]. Точками 2 на рисунке обозначены значения σ_y , рассчитанные по формуле $\sigma_y = H/3$, где H — значения микротвердости α -Fe при изменении размера зерен от 10 nm до 20 μm [32]. Кривая на рисунке проведена в соответствии с уравнением

$$\sigma_y = \sigma(d, \varepsilon_y) = m \left[\tau_p + \alpha \mu \left(\frac{b}{d} \right)^{1/2} \chi_y(d) \right], \quad (13)$$

где $\alpha = 0.5$, $b = 0.248$, $\mu = 83$ GPa, $\tau_p = 124$ GPa. Величина $\chi_y(d)$ рассчитывалась согласно соотношению (7с) при $\varepsilon = \varepsilon_y = 2 \cdot 10^{-3}$, $\beta = 1$, $\beta_0 = 0.065$, $k_b(d) = (d_b/d)^2$, где $d_b = 180$ nm. Из расчета следует, что при размерах нанозерен $d < 20$ nm в НК- α -Fe имеет место зернограничное разупрочнение. Значение параметра $d_b = 180$ nm для α -Fe при 293 K сопоставимо с его значениями, найденными выше для НК-сплава Ni–W (80 nm), а также для НК-меди (220 nm) и никеля (110 nm) [6]. Это означает, что, как и в ГЦК-металлах, в α -Fe энергия активации зернограничной диффузии должна быть величиной порядка 1 eV.

На рис. 5 кривые 1–3 иллюстрируют результаты расчета зависимостей коэффициента S от размера зерна

согласно соотношениям (12) и (13) при $\varepsilon = \varepsilon_y$, $l_p = 30b$, $\xi = 1$. Кривая 1 показывает эту зависимость, когда в числителе формулы (12) отсутствуют два последних члена, т.е. не учитывается вклад в активационный объем леса дислокаций в объеме и границах нанозерен. Видно, что при $d < 20$ nm коэффициент S вследствие зернограничного разупрочнения меняет характер своей зависимости от размера зерна и вместо снижения демонстрирует рост в соответствии с приведенными на рис. 5 экспериментальными данными. Кривые 2 и 3 на этом рисунке построены с последовательным учетом второго и третьего членов в числителе выражения (12), т.е. с учетом вклада в эффективный активационный объем леса дислокаций соответственно в границах и объеме зерен. Видно, что это улучшает соответствие между экспериментом и теорией в области размеров нанозерен $d < 20$ nm. При больших размерах зерен $d > 100 \mu\text{m}$ величина коэффициента S достигает постоянного значения $S = k_B T / b^2 l_p \tau_p = 0.07$, определяемого только параметрами рельефа Пайерлса.

Что касается температурной чувствительности напряжений течения $S_T = \partial \tau / \partial T$ в НК-металлах, имеющих заметный рельеф Пайерлса, то, согласно данным [33], в α -Ti уменьшение размера зерен с 40 μm до 250 nm не привело к изменению величины $\partial \tau_y / \partial T$ для предела текучести в диапазоне температур $T < 150$ K. В этом температурном диапазоне пластическую деформацию титана определяет скольжение по призматическим плоскостям, связанное с преодолением дислокациями рельефа Пайерлса. Подставляя в выражение (11) эффективный активационный объем, получаем следующее соотношение для величины коэффициента S_T на пределе текучести:

$$S_T = \left[1 + \frac{l_p}{\xi d} + \frac{l_p}{(bd)^{1/2}} \chi_y \right] \frac{k_B}{b^2 l_p} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}} \right). \quad (14)$$

Поскольку в α -Ti величина активационных объемов при $T < 150$ K не превышает $30b^3$ [33,34], для расстояния l_p имеем оценку $l_p = 30b \approx 10$ nm. Следовательно, в квадратной скобке в [14] $l_p \ll d$; третье слагаемое с учетом того, что $\chi_y \ll 1$, также существенно меньше единицы. Это означает, что при низких температурах в НК-титане с размером зерен до $d \approx 10$ –20 nm температурная и скоростная чувствительности напряжений течения определяются только рельефом Пайерлса.

Таким образом, дислокационно-кинетический подход к анализу механизма пластической деформации НК-металлов и сплавов позволяет сделать не только качественные заключения об этом механизме, но и получить количественные соотношения. Эффективность такого подхода, основанного на уравнениях дислокационной кинетики, связана с тем, что указанные уравнения учитывают кинетические свойства границ зерен как источников, стоков и барьеров для движущихся дислокаций. Сделанный в работе количественный анализ зависимости коэффициента СЧ напряжений течения от

размера зерна, температуры и скорости деформации для ряда НК-металлов с ГЦК- и ОЦК-решетками позволяет заключить, что ступеньки на границах нанозерен, образовавшиеся при эмиссии и поглощении решеточных дислокаций, выступают в качестве барьеров с коротким радиусом действия, которые движущиеся дислокации преодолевают с помощью тепловых флуктуаций.

Список литературы

- [1] R.A. Masumura, P.M. Hazzledine, C.S. Pande. *Acta Mater.* **46**, 4527 (1998).
- [2] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A. Mukherjee, H. Gleiter. *Acta Mater.* **53**, 1 (2005).
- [3] H. Conrad, K. Jung. *Mater. Sci. Eng. A* **406**, 78 (2005).
- [4] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson. *Progr. Mater. Sci.* **51**, 427 (2006).
- [5] J.C.M. Li. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 041 912 (2007).
- [6] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 961 (2007).
- [7] F. Sasoz, J.F. Molinary. *Acta Mater.* **53**, 1931 (2005).
- [8] H. Van Swygenhoven, D. Farcas, A. Caro. *Phys. Rev. B* **62**, 831 (2000).
- [9] A. Hasnaoui, P.M. Derlet, H. Van Swygenhoven. *Acta Mater.* **52**, 2251 (2004).
- [10] A.G. Frøset, P.M. Derlet, H. Van Swygenhoven. *Acta Mater.* **52**, 5863 (2004).
- [11] K.M. Youssef, R.O. Scattergood, K.L. Murty, J.A. Horton, C.C. Koch. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 091 904 (2005).
- [12] X.-L. Wu, E. Ma. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 231 911 (2006).
- [13] P.L. Gai, K. Zhang, J. Weertman. *Scripta Mater.* **56**, 25 (2007).
- [14] Q. Wei, S. Cheng, K.T. Ramesh, E. Ma. *Mater. Sci. Eng. A* **381**, 71 (2004).
- [15] R.J. Asaro, S. Suresh. *Acta Mater.* **53**, 3369 (2005).
- [16] 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).
- [17] Y.M. Wang, A.V. Hamza, E. Ma. *Acta Mater.* **54**, 2715 (2006).
- [18] J. Chen, L. Lu, K.Lu. *Scripta Mater.* **54**, 1913 (2006).
- [19] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **37**, 2281 (1995).
- [20] Y.M. Wang, E. Ma. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 2750 (2004).
- [21] H. Conrad. *Acta Met.* **11**, 75 (1963).
- [22] M.F. Ashby. *Phil. Mag. A* **21**, 399 (1970).
- [23] J.C.M. Li, T. Chou. *Metal. Trans.* **1**, 1143 (1970).
- [24] J. Sciøtz. *Scripta Mater.* **51**, 837 (2004).
- [25] A. Giga, Y. Kimoto, Y. Takigawa, K. Higashi. *Scripta Mater.* **55**, 143 (2006).
- [26] D.L. Wang, Q.P. Kong, J.P. Shui. *Scripta Met. Mater.* **31**, 47 (1994).
- [27] Y.M. Wang, E. Ma. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 3165 (2003).
- [28] Z. Huang, L.Y. Gu, J.R. Weertman. *Scripta Mater.* **37**, 1071 (1997).
- [29] J.E. Dorn, S. Rajnak. *Trans. Met. Soc. AIME* **230**, 1052 (1964).
- [30] Г.А. Малыгин. *ФММ* **58**, 360 (1984).
- [31] D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma. *Acta Mater.* **51**, 3495 (2003).
- [32] D. Jang, M. Atzmon. *J. Appl. Phys.* **93**, 9282 (2003).
- [33] В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Н.Н. Песчанская, А.Е. Романов, Б.И. Смирнов, И.А. Александров, Н.А. Еникеев, В.У. Казыханов, А.А. Назаров. *ФТТ* **49**, 644 (2007).
- [34] В.А. Москаленко, В.Д. Нацик, В.Н. Ковалев. *ФНТ*, **31**, 1190 (2005).