

## Зернограничное скольжение и эмиссия решеточных дислокаций в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации

© М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 26 октября 2004 г.)

Предложена теоретическая модель, описывающая физические механизмы упрочнения и разупрочнения в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации. В рамках модели тройные стыки границ зерен выступают в роли препятствий для скольжения зернограничных дислокаций — носителей зернограничного скольжения. Рассмотрены энергетические характеристики трансформаций ансамбля зернограничных дислокаций на тройных стыках границ зерен, приводящие к образованию разностных дислокаций и к локальной миграции тройных стыков. Накопление разностных дислокаций в тройных стыках дает эффект упрочнения и инициирует внутриверное решеточное скольжение. При достижении векторами Бюргера разностных дислокаций критических значений происходит испускание решеточных дислокаций в прилегающие зерна, которое сглаживает эффект упрочнения. Локальная миграция тройных стыков границ зерен, вызванная зернограничным скольжением, и испускание решеточных дислокаций приводят к разупрочнению нанокристаллического материала. Построена зависимость напряжения течения от общей пластической деформации, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-01-00211), программы Министерства науки и образования РФ по твердотельным наноструктурам, ИНТАС (грант № 03-51-3779), научной программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций. Взаимодействие нано-, микро-, мезо- и макромасштабов при деформировании и разрушении“, Фонда содействия отечественной науке, программы „Интеграция“ (грант Б0026) и Санкт-Петербургского научного центра РАН.

Эффект сверхпластичности твердых тел уже давно и успешно используется в технологии традиционных металлов и сплавов [1–5]. В последние годы фундаментальные исследования этого явления были сконцентрированы на изучении сверхпластичности микрокристаллических [5–11] и нанокристаллических [5,11–15] материалов. Оказалось, что эффект сверхпластичности в этих материалах достигается при более низких температурах и более высоких скоростях деформации, что открывает огромные перспективы его промышленного использования. Кроме того, было обнаружено существенное упрочнение материала в процессе сверхпластической деформации. Особенно значительные величины предела текучести и упрочнения достигаются при деформировании нанокристаллических материалов (НКМ) со средним размером зерна порядка 50 нм [12–15]. При этом кривые деформирования имеют форму колокола с ярко выраженными длительными стадиями упрочнения и разупрочнения.

В настоящее время считается общепринятым [16–19], что уникальные механические свойства НКМ связаны с высокой плотностью границ зерен и их тройных стыков. Границы зерен затрудняют действие обычных источников (типа Франка–Рида) решеточных дислокаций и служат препятствиями для их скольжения. Вследствие этого вклад в деформацию НКМ от скольжения решеточных дислокаций значительно снижается по сравнению с крупнозернистыми поликристаллами. Это вызывает

активизацию других механизмов пластической деформации, связанных с перемещением и трансформациями зернограничных дефектов (дислокаций и дисклинаций), которые обычно слабо проявляются в крупнозернистых материалах. Высокая исходная концентрация таких зернограничных дефектов обусловлена сильно неравновесными условиями получения НКМ [12,16,20]. К основным механизмам пластичности в НКМ относят: диффузию по границам зерен [17,21–23], диффузию по тройным стыкам зерен [24], вращение зерен [25,26] и зернограничное скольжение [27–29]. Именно зернограничное скольжение, сопровождаемое механизмами аккомодации — миграцией границ зерен и приграничным решеточным скольжением — считается доминирующим механизмом сверхпластической деформации в НКМ [11,15]. В этом случае необычные эффекты упрочнения НКМ на начальной стадии сверхпластической деформации и его последующего разупрочнения, а также очень высокие значения предела текучести могут быть связаны со специфическими особенностями зернограничного скольжения.

В работах [30,31] были предложены теоретические модели механизмов, способных приводить к сильному упрочнению и последующему разупрочнению НКМ при сверхпластической деформации. Эти модели основаны на рассмотрении особенностей зернограничного скольжения вблизи изолированных тройных стыков границ зерен и на учете миграции границ и стыков. При этом не

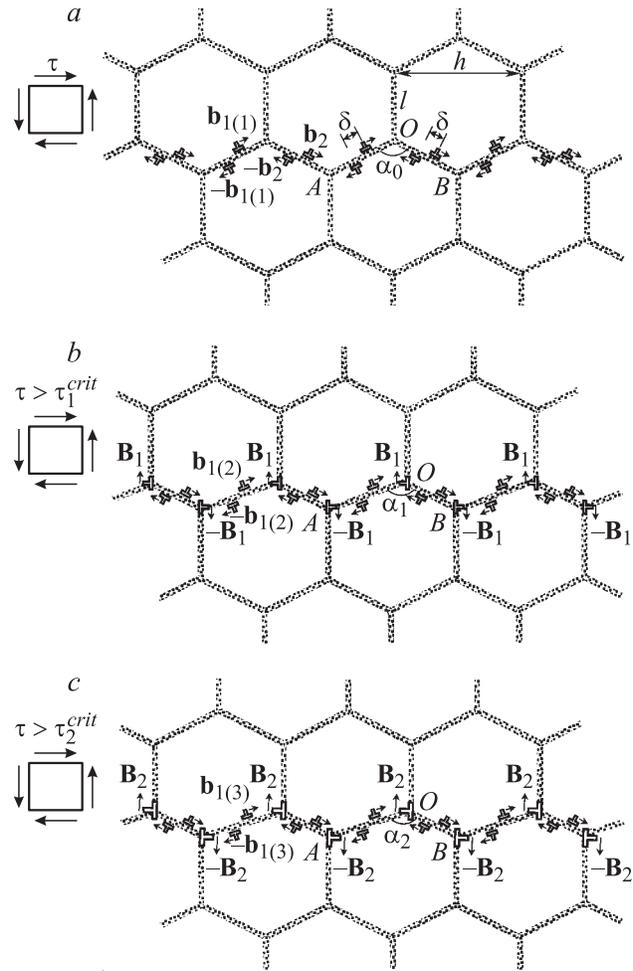
учитывалось влияние соседних тройных стыков и не рассматривалась возможность аккомодации зернограничной дефектной структуры за счет испускания решеточных дислокаций.

Цель настоящей работы — разработка теоретической модели, дающей детальное описание особенностей сверхпластической деформации (эффектов упрочнения и разупрочнения, а также высокого предела текучести) в НКМ. Эта модель учитывает коллективное поведение зернограничных дефектных структур и зарождение решеточных дислокаций на тройных стыках границ зерен как механизм аккомодации этих структур. Результаты модели сравниваются с экспериментальными данными [13] по сверхпластичности нанокристаллического алюминия.

## 1. Модель трансформации зернограничных дислокаций на тройных стыках границ зерен

Рассмотрим эволюцию зернограничных дефектов в нанокристаллическом твердом теле при сверхпластической деформации. Границы зерен в НКМ часто содержат избыточное количество зернограничных дислокаций, которые являются носителями зернограничного скольжения. При приложении внешней нагрузки в материале возникают сдвиговые напряжения, приводящие к скольжению подвижных зернограничных дислокаций (с векторами Бюргерса, параллельными плоскостям границ зерен). Тройные стыки границ зерен служат эффективными стопорами для их скольжения. Для преодоления такого стопора внешнее сдвиговое напряжение должно превысить некоторое критическое значение, которое зависит как от геометрии тройного стыка, так и от характеристик окружающей дефектной структуры. Поскольку в НКМ плотность тройных стыков чрезвычайно высока, можно предположить, что критическое сдвиговое напряжение, необходимое для преодоления зернограничными дислокациями тройных стыков зерен, определяет вклад зернограничного скольжения в действующее напряжение. Учитывая, что зернограничное скольжение является доминирующим механизмом сверхпластической деформации, нужно признать, что это критическое напряжение определяет напряжение течения в НКМ при сверхпластичности. Таким образом, зависимость критического сдвигового напряжения от деформации в общих чертах характеризует сверхпластическое поведение НКМ.

Для оценки величины такого критического напряжения и изучения его зависимости от деформации НКМ предлагается использовать следующую модель. Возьмем бесконечную двумерную упаковку гексагональных зерен одинаковой формы и размера (рис. 1, *a*). Выберем некоторую ломаную поверхность, образованную соединенными между собой границами зерен, стыки которых лежат на двух горизонтальных прямых — „верхней“ и „нижней“. Предполагается, что вдоль этих прямых



**Рис. 1.** Образование разностных дислокаций в тройных стыках зерен в результате скольжения зернограничных дислокаций (*a*) и увеличение их мощности (величины вектора Бюргерса) при каждом акте зернограничной деформации (*b, c*).

действует максимальное сдвиговое напряжение  $\tau$ , причем угол раствора между рассматриваемыми границами достаточно велик ( $> 120^\circ$ ). Предполагается также, что эти границы содержат подвижные зернограничные дислокации, способные скользить в плоскости „своей“ границы, причем эти дислокации образуют дипольные конфигурации. При достаточно большом  $\tau$  начинается их скольжение и быстро переходит в новое квазиравновесное состояние, определяемое как уровнем  $\tau$ , так и характеристиками самой этой структуры. Таким образом, осуществляется зернограничное скольжение вдоль выбранной ломаной поверхности. Рассмотрим процесс такого скольжения более детально.

Для простоты последующих расчетов возьмем бесконечную периодическую дефектную конфигурацию, образованную бесконечными рядами диполей зернограничных дислокаций, распределенных по границам зерен одинаковой длины  $l$  (рис. 1, *a*). Исходная конфигурация состоит из двух рядов диполей зернограничных дислока-

ций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}_{1(1)}$  и  $\pm \mathbf{b}_2$ , параллельными плоскостям „своих“ границ зерен. Для определенности предполагается, что эти дислокационные диполи имеют одинаковое плечо  $\delta$  и их центральные точки совпадают с центрами границ зерен. Длина плеча  $\delta$  показывает степень неоднородности границы зерна. Чем меньше  $\delta$ , тем меньше избыточная энергия границы и выше степень ее однородности. Период такой дефектной структуры равен расстоянию  $h$  между двумя соседними тройными стыками границ зерен. Для простоты расчетов в модели предполагается, что все дефектные структуры, образовавшиеся в результате трансформации исходной структуры, являются дипольными и периодическими с тем же периодом  $h$ . Таким образом, ансамбль таких дипольных периодических структур представляет собой самоэкранированную низкоэнергетическую дефектную конфигурацию.

Одинаковая периодичность всех дефектных структур позволяет выбрать один стык границ зерен для подробного рассмотрения эволюции дефектной системы. Пусть этим тройным стыком будет стык  $AOB$  (рис. 1, *b*). Геометрия тройного стыка границ зерен задается длиной  $l_i$  прилегающих к нему границ ( $i = 1, 2$  — обозначение границы; в начальном состоянии длины границ равны:  $l_i = l$ ) и углом раствора  $\alpha_n$  между границами (в начальном состоянии —  $\alpha_0$ ), по которым осуществляется скольжение зернограницных дислокаций.

Если сдвиговое напряжение  $\tau$ , достаточное для скольжения зернограницных дислокаций, меньше некоторого критического ( $\tau < \tau_1^{\text{crit}}$ ), зернограницные дислокации с векторами Бюргера  $\mathbf{b}_{1(1)}$  и  $-\mathbf{b}_2$  останавливаются около „верхнего“ тройного стыка границ зерен, пройдя среднее расстояние  $(l - \delta)/2$ . Для определенности положим, что элементарным актом зернограницного скольжения в масштабе зерна является „прохождение“ зернограницной дислокации с вектором Бюргера  $-\mathbf{b}_2$  ( $-\mathbf{b}_2$ -дислокации) через тройной стык. Это становится возможным при  $\tau = \tau_1^{\text{crit}}$ . Преодолев тройной стык,  $-\mathbf{b}_2$ -дислокация вступает в реакцию с зернограницной дислокацией с вектором Бюргера  $\mathbf{b}_{1(1)}$  ( $\mathbf{b}_{1(1)}$ -дислокацией), поджатой к этому тройному стыку с другой стороны. В результате реакции образуется разностная дислокация с вектором Бюргера  $\mathbf{V}_1 = \mathbf{b}_{1(1)} - \mathbf{b}_2$  ( $\mathbf{V}_1$ -дислокация), не способная скользить ни в одной из смежных межзеренных границ (рис. 1, *b*). Тройной стык в свою очередь с течением времени перемещается на малое расстояние  $b_2$  под действием термодинамической силы натяжения межзеренных границ. В рамках этой модели рассмотренный процесс считается элементарным актом сверхпластической деформации в нанокристаллическом образце под действием внешней механической нагрузки.

После первого акта зернограницного скольжения (рис. 1, *a, b*) происходит зарождение двух новых рядов диполей зернограницных дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}_{1(2)}$  и  $\pm \mathbf{b}_2$ . В частности, зарождение двух таких диполей зернограницных дислокаций происходит

на границах  $AO$  и  $OB$ . Заметим, что в рамках принятой модели первый из этих векторов Бюргера меняется при каждом элементарном акте зернограницного скольжения, поскольку меняется ориентация границы  $AO$ , тогда как второй вектор Бюргера остается постоянным из-за постоянства ориентации границы  $OB$ . Под действием внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  зернограницные  $\mathbf{b}_{1(2)}$ - и  $-\mathbf{b}_2$ -дислокации скользят к тройному стыку  $AOB$ . Эти дислокации упруго взаимодействуют с разностной  $\mathbf{V}_1$ -дислокацией, которая затрудняет их движение. Поэтому для осуществления нового элементарного акта зернограницного скольжения требуется повышение величины внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  до некоторого критического значения  $\tau_2^{\text{crit}} > \tau_1^{\text{crit}}$ . В результате этого акта формируется дислокация с вектором Бюргера  $\mathbf{V}'_2 = \mathbf{b}_{1(2)} - \mathbf{b}_2$ , которая вступает в реакцию с  $\mathbf{V}_1$ -дислокацией. Эта реакция приводит к образованию новой разностной дислокации с вектором Бюргера  $\mathbf{V}_2 = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}'_2$  (рис. 1, *c*).

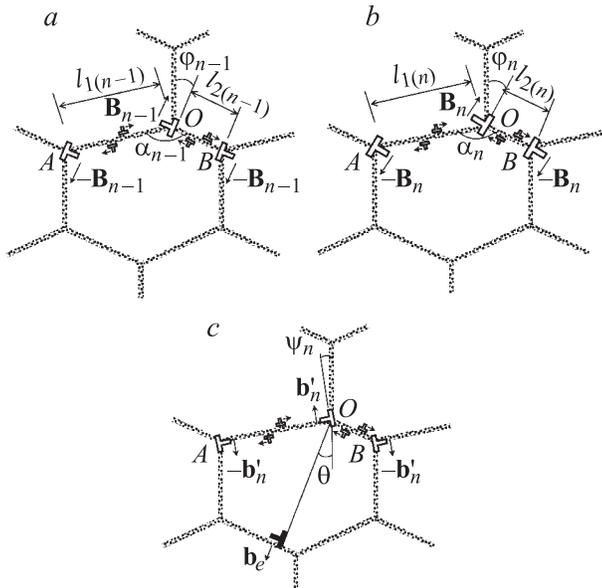
Такая последовательная трансформация зернограницной структуры повторяется многократно. На каждом шаге происходит увеличение векторов Бюргера разностных дислокаций, которые находятся в тройных стыках границ зерен. Рост векторов Бюргера разностных дислокаций приводит к увеличению критического сдвигового напряжения. Применительно к отдельному изолированному тройному стыку такая модель подробно исследовалась в [30,31]. Предполагается, что именно этот механизм вызывает сильное упрочнение, которое экспериментально наблюдается в НКМ при сверхпластической деформации [12–15].

## 2. Энергетические характеристики трансформаций зернограницных дислокаций на тройных стыках границ зерен

Исследуем переход дефектной системы из состояния  $n - 1$  с полной энергией  $W_{n-1}$  в состояние  $n$  с полной энергией  $W_n$  (рис. 2, *a, b*). Такая трансформация дефектной системы энергетически выгодна при выполнении условия  $\Delta W_n = W_n - W_{n-1} < 0$ . Выражение  $\Delta W_n = 0$  позволяет найти набор критических параметров перехода дефектной системы из состояния  $n - 1$  в состояние  $n$ . Все энергии берутся здесь в расчете на один период  $h$  дефектной структуры.

Рассмотрим сначала геометрические характеристики периодической структуры тройных стыков границ зерен. Поскольку все тройные стыки предполагаются одинаковыми, достаточно ограничиться рассмотрением одного из них, например стыка  $AOB$  (рис. 2). В начальном (недеформированном) состоянии угол раствора стыка  $AOB$  равен  $\alpha_0$ , а все границы, прилегающие к нему, имеют одинаковую длину  $l$  (рис. 1, *a*). Тогда период  $h$ , который является одинаковым для всех дефектных структур, дается следующим выражением:

$$h = 2l \sin \frac{\alpha_0}{2}. \quad (1)$$



**Рис. 2.** Увеличение мощности разностных дислокаций (*a, b*) и испускание решеточной дислокации тройным стыком границ зерен (*c*).

Геометрию тройного стыка  $AOB$  в состоянии  $n$  дефектной системы можно описать через исходные значения длины границ и угла между ними ( $l$  и  $\alpha_0$ ) и величину смещения  $nb_2$  тройного стыка следующим образом:

$$l_{2(n)} = l - 2nb_2, \quad (2)$$

$$l_{1(n)} = \sqrt{l_{2(n)}^2 \cos^2 \frac{\alpha_0}{2} + \left(h - l_{2(n)} \sin \frac{\alpha_0}{2}\right)^2}, \quad (3)$$

$$\alpha_n = \arccos\left(\frac{l_{1(n)}^2 + l_{2(n)}^2 - h^2}{2l_{1(n)}l_{2(n)}}\right), \quad (4)$$

где  $l_{1(n)}$  — длина границы  $AO$ ,  $l_{2(n)}$  — длина границы  $OB$  и  $\alpha_n$  — угол раствора стыка  $AOB$  в состоянии  $n$ . В формуле (2) берется удвоенное значение смещения тройного стыка  $2nb_2$ , так как по границе  $OB$  происходит одновременный сдвиг двух тройных стыков  $O$  и  $B$ .

Величина вектора Бюргерса  $B_n$  и угол  $\varphi_n$ , которые характеризуют разностную дислокацию в состоянии  $n$  (рис. 2, *b*), выражаются через характеристики  $B_{n-1}$  и  $\varphi_{n-1}$  этой дислокации в состоянии  $n-1$  (рис. 2, *a*):

$$B_n = \sqrt{B_{n-1}^2 + \tilde{B}_n^2 + 2B_{n-1}\tilde{B}_n \cos\left(\frac{\alpha_n - \alpha_0}{2} - \varphi_{n-1}\right)}, \quad (5)$$

$$\varphi_n = \frac{\alpha_n - \alpha_0}{2} - \arcsin\left\{\frac{B_{n-1}}{B_n} \sin\left(\frac{\alpha_n - \alpha_0}{2} - \varphi_{n-1}\right)\right\}, \quad (6)$$

где  $\tilde{B}_n = b_2\sqrt{2 + 2\cos\alpha_n}$ .

Перейдем к расчету энергетических характеристик. Энергия дефектной системы в состоянии  $n-1$  (рис. 2, *a*)

состоит из следующих слагаемых:

$$W_{n-1} = E_{\text{self}}^{B_{n-1}} + E_{\text{self}}^{b_{1(n-1)}} + E_{\text{self}}^{b_2} + E_c^{B_{n-1}} + E_c^{b_{1(n-1)}} + E_c^{b_2} + E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_{1(n-1)}} + E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_2} + E_{\text{int}}^{b_{1(n-1)}-b_2}, \quad (7)$$

где  $E_{\text{self}}^{B_{n-1}}$ ,  $E_{\text{self}}^{b_{1(n-1)}}$  и  $E_{\text{self}}^{b_2}$  — соответственно собственные упругие энергии бесконечного ряда диполей разностных дислокаций с векторами Бюргерса  $\pm B_{n-1}$  и двух бесконечных рядов диполей скользящих зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса  $\pm b_{1(n-1)}$  и  $\pm b_2$ ;  $E_c^{B_{n-1}}$ ,  $E_c^{b_{1(n-1)}}$  и  $E_c^{b_2}$  — энергии дислокационных ядер разностных и скользящих дислокаций;  $E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_{1(n-1)}}$  и  $E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_2}$  — соответственно энергии упругого взаимодействия между рядом диполей разностных  $\pm B_{n-1}$ -дислокаций и двумя рядами диполей скользящих  $\pm b_{1(n-1)}$ - и  $\pm b_2$ -дислокаций;  $E_{\text{int}}^{b_{1(n-1)}-b_2}$  — энергия упругого взаимодействия между рядами диполей скользящих  $\pm b_{1(n-1)}$ - и  $\pm b_2$ -дислокаций.

На один период  $h$  приходится две разностные и четыре скользящие дислокации. Вклад от их ядер может быть записан следующим образом [32]:

$$E_c^{B_{n-1}} = DB_{n-1}^2, \quad (8)$$

$$E_c^{b_{1(n-1)}} = Db_{1(n-1)}^2, \quad (9)$$

$$E_c^{b_2} = Db_2^2, \quad (10)$$

где  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ ,  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона.

Собственная упругая энергия  $E_{\text{self}}^{B_{n-1}}$  ряда диполей разностных дислокаций в расчете на один период  $h$  вычисляется как работа по зарождению диполя разностных дислокаций в суммарном поле напряжений бесконечного ряда таких диполей, что дает

$$E_{\text{self}}^{B_{n-1}} = \frac{DB_{n-1}^2}{2} \left\{ \cos^2 \varphi_{n-1} [\Psi_1(y_0 - r_c) - \Psi_1(r_c) + \Phi_-(x_0 - r_c, 0) - \Phi_-(r_c, 0) + \Phi_+(x_0 - r_c, y_0) - \Phi_+(r_c, y_0) + \Phi_+(x_0, y_0 - r_c) - \Phi_+(x_0, r_c)] + \sin^2 \varphi_{n-1} [\Psi_1(y_0 - r_{c_0}) - \Psi_1(r_{c_0}) + \Phi_+(x_0 - r_{c_0}, 0) - \Phi_+(r_{c_0}, 0) + \Phi_-(x_0 - r_{c_0}, y_0) - \Phi_-(r_{c_0}, y_0) + \Phi_-(x_0, y_0 - r_{c_0}) - \Phi_-(x_0, r_{c_0})] \right\}, \quad (11)$$

где

$$\Psi_1(t) = \ln \sin \frac{\pi t}{h},$$

$$\Phi_{\pm}(t_1, t_2) = \ln \left[ \cos \frac{2\pi t_2}{h} - \text{ch} \frac{2\pi t_1}{h} \right]$$

$$\pm \frac{\pi t_1}{h} \frac{\text{sh} \frac{2\pi t_1}{h}}{\cos \frac{2\pi t_2}{h} - \text{ch} \frac{2\pi t_1}{h}},$$

$$r_c \approx B_{n-1} \cos \varphi_{n-1}, \quad r_{c_0} \approx B_{n-1} \sin \varphi_{n-1},$$

$$x_0 = l_{2(n-1)} \cos \frac{\alpha_0}{2}, \quad y_0 = l_{2(n-1)} \sin \frac{\alpha_0}{2}.$$

Собственные энергии  $E_{\text{self}}^{b_1(n-1)}$  и  $E_{\text{self}}^{b_2}$  определяются аналогичными выражениями

$$E_{\text{self}}^{b_1(n-1)} = \frac{Db_1^2(n-1)}{2} \left\{ \cos^2(\alpha_{n-1} - \alpha_0/2) [\Psi_1(R_2 - r_{c_1}) - \Psi_1(r_{c_1}) + \Phi_-(R_1 - r_{c_1}, 0) - \Phi_-(r_{c_1}, 0) + \Phi_+(R_1 - r_{c_1}, R_2) - \Phi_+(r_{c_1}, R_2) + \Phi_+(R_1, R_2 - r_{c_1}) - \Phi_+(R_1, r_{c_1})] + \sin^2(\alpha_{n-1} - \alpha_0/2) [\Psi_1(R_2 - r_{c_2}) - \Psi_1(r_{c_2}) + \Phi_+(R_1 - r_{c_2}, 0) - \Phi_+(r_{c_2}, 0) + \Phi_-(R_1 - r_{c_2}, R_2) - \Phi_-(r_{c_2}, R_2) + \Phi_-(R_1, R_2 - r_{c_2}) - \Phi_-(R_1, r_{c_2})] \right\}, \quad (12)$$

$$E_{\text{self}}^{b_2} = \frac{Db_2^2}{2} \left\{ \cos^2(\alpha_0/2) [\Psi_1(R_4 - r_{c_3}) - \Psi_1(r_{c_3}) + \Phi_-(R_3 - r_{c_3}, 0) - \Phi_-(r_{c_3}, 0) + \Phi_+(R_3 - r_{c_3}, R_4) - \Phi_+(r_{c_3}, R_4) + \Phi_+(R_3, R_4 - r_{c_3}) - \Phi_+(R_3, r_{c_3})] + \sin^2(\alpha_0/2) [\Psi_1(R_4 - r_{c_4}) - \Psi_1(r_{c_4}) + \Phi_+(R_3 - r_{c_4}, 0) - \Phi_+(r_{c_4}, 0) + \Phi_-(R_3 - r_{c_4}, R_4) - \Phi_-(r_{c_4}, R_4) + \Phi_-(R_3, R_4 - r_{c_4}) - \Phi_-(R_3, r_{c_4})] \right\}, \quad (13)$$

где

$$R_1 = \frac{\delta}{2} \cos\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \quad R_2 = \frac{\delta}{2} \sin\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \\ R_3 = \frac{\delta}{2} \cos \frac{\alpha_0}{2}, \quad R_4 = \frac{\delta}{2} \sin \frac{\alpha_0}{2}, \\ r_{c_1} \approx b_1(n-1) \cos\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \\ r_{c_2} \approx b_1(n-1) \sin\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \\ r_{c_3} \approx b_2 \cos \frac{\alpha_0}{2}, \quad r_{c_4} \approx b_2 \sin \frac{\alpha_0}{2}.$$

Энергии взаимодействия  $E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_1(n-1)}$  и  $E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_2}$  (в расчете на один период  $h$ ) вычисляются как работы по зарождению диполей скользящих  $\pm \mathbf{b}_1(n-1)$ - и  $\pm \mathbf{b}_2$ -дислокаций в суммарном поле бесконечного ряда диполей разностных  $\pm \mathbf{B}_{n-1}$ -дислокаций. В результате получаем следующие формулы:

$$E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_1(n-1)} = 2DB_{n-1}b_1(n-1) \left\{ \cos \varphi_{n-1} \cos(\alpha_{n-1} - \alpha_0/2) \times [\Phi_+(x_1, R_2 + y_1) - \Phi_+(R_1 - x_1, y_1)] + \sin \varphi_{n-1} \sin(\alpha_{n-1} - \alpha_0/2) [\Phi_-(x_1, R_2 + y_1) - \Phi_-(R_1 - x_1, y_1)] + \sin(\varphi_{n-1} + \alpha_{n-1} - \alpha_0/2) \times [\Psi_2(R_1, R_2 + y_1) + \Psi_2(R_1 - x_1, y_1)] \right\}, \quad (14)$$

$$E_{\text{int}}^{B_{n-1}-b_2} = 2DB_{n-1}b_2 \left\{ \cos \varphi_{n-1} \cos(\alpha_0/2) \times [\Phi_+(x_2, R_4 + y_2) - \Phi_+(R_3 - x_2, y_2)] + \sin \varphi_{n-1} \sin(\alpha_0/2) [\Phi_-(x_2, R_4 + y_2) - \Phi_-(R_3 - x_2, y_2)] + \sin(\alpha_0/2 - \varphi_{n-1}) \times [\Psi_2(R_3, R_4 + y_2) + \Psi_2(R_3 - x_2, y_2)] \right\}, \quad (15)$$

где

$$x_1 = \frac{l_1(n-1) + \delta}{2} \cos\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \\ x_2 = \frac{l_2(n-1) + \delta}{2} \cos \frac{\alpha_0}{2}, \\ y_1 = \frac{l_1(n-1) - \delta}{2} \sin\left(\alpha_{n-1} - \frac{\alpha_0}{2}\right), \\ y_2 = \frac{l_2(n-1) - \delta}{2} \sin \frac{\alpha_0}{2}.$$

Аналогично формулам (14), (15) записывается выражение для энергии  $E_{\text{int}}^{b_1(n-1)-b_2}$

$$E_{\text{int}}^{b_1(n-1)-b_2} = 2Db_1(n-1)b_2 \left\{ \cos(\alpha_0/2) \cos(\alpha_{n-1} - \alpha_0/2) \times [\Phi_+(x_3, R_2 + y_3) - \Phi_+(R_1 - x_3, y_3)] + \sin(\alpha_0/2) \sin(\alpha_{n-1} - \alpha_0/2) [\Phi_-(x_3, R_2 + y_3) - \Phi_-(R_1 - x_3, y_3)] + \sin \alpha_{n-1} [\Psi_2(R_1, R_2 + y_3) + \Psi_2(R_1 - x_3, y_3)] \right\}, \quad (16)$$

где  $x_3 = R_1 + R_3$ ,  $y_3 = y_1 + y_2$ .

Энергия дефектной системы (в расчете на один период  $h$ ) после  $n$ -й трансформации зернограницных дислокаций на тройных стыках (рис. 2, *b*) состоит из следующих слагаемых:

$$W_n = E_{\text{self}}^{B_n} + E_{\text{self}}^{b_1(n)} + E_{\text{self}}^{b_2} + E_c^{B_n} + E_c^{b_1(n)} + E_c^{b_2} + E_{\text{int}}^{B_n-b_1(n)} + E_{\text{int}}^{B_n-b_2} + E_{\text{int}}^{b_1(n)-b_2} + W_b + E_\tau, \quad (17)$$

где  $E_{\text{self}}^{B_n}$ ,  $E_{\text{self}}^{b_1(n)}$  и  $E_{\text{self}}^{b_2}$  — соответственно собственные упругие энергии бесконечного ряда диполей разностных дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{B}_n$  и двух бесконечных рядов диполей скользящих зернограницных дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}_1(n)$  и  $\pm \mathbf{b}_2$ ;  $E_c^{B_n}$ ,  $E_c^{b_1(n)}$  и  $E_c^{b_2}$  — энергии ядер разностных и скользящих дислокаций;  $E_{\text{int}}^{B_n-b_1(n)}$  и  $E_{\text{int}}^{B_n-b_2}$  — энергии упругого взаимодействия соответственно между рядом диполей разностных  $\pm \mathbf{B}_n$ -дислокаций и двумя рядами диполей скользящих  $\pm \mathbf{b}_1(n)$ - и  $\pm \mathbf{b}_2$ -дислокаций;  $E_{\text{int}}^{b_1(n)-b_2}$  — энергия упругого взаимодействия между рядами диполей скользящих  $\pm \mathbf{b}_1(n)$ - и  $\pm \mathbf{b}_2$ -дислокаций;  $W_b$  — энергетический барьер, который необходимо преодолеть зернограницным  $\mathbf{b}_2$ - и  $-\mathbf{b}_2$ -дислокациям для прохода через соответствующие тройные стыки;  $E_\tau$  — работа,

совершаемая внешним сдвиговым напряжением  $\tau$  по перемещению зернограничных дислокаций с векторами Бюргерса  $\pm \mathbf{b}_{1(n-1)}$  и  $\pm \mathbf{b}_2$  соответственно на расстояния  $(l_{1(n-1)} - \delta)/2$  и  $(l_{2(n-1)} - \delta)/2$ .

Энергии  $E_c^{b_2}$  и  $E_{\text{self}}^{b_2}$  остаются неизменными и определяются соответственно формулами (10) и (13).

Выражения для собственных энергий  $E_{\text{self}}^{B_n}$  и  $E_{\text{self}}^{b_{1(n)}}$  легко получить соответственно из формул (11) и (12) простой заменой  $B_{n-1}$ ,  $\varphi_{n-1}$  и  $l_{2(n-1)}$  на  $B_n$ ,  $\varphi_n$  и  $l_{2(n)}$  (для  $E_{\text{self}}^{B_n}$ ) и  $b_{1(n-1)}$ ,  $\alpha_{n-1}$  на  $b_{1(n)}$ ,  $\alpha_n$  (для  $E_{\text{self}}^{b_{1(n)}}$ )

$$E_{\text{self}}^{B_n} = E_{\text{self}}^{B_{n-1}}(B_{n-1} \rightarrow B_n, \varphi_{n-1} \rightarrow \varphi_n, l_{2(n-1)} \rightarrow l_{2(n)}), \quad (18)$$

$$E_{\text{self}}^{b_{1(n)}} = E_{\text{self}}^{b_{1(n-1)}}(b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n). \quad (19)$$

Энергии  $E_c^{B_n}$  и  $E_c^{b_{1(n)}}$  получаются из формул (8)–(10) заменой  $B_{n-1}$  и  $b_{1(n-1)}$  на  $B_n$  и  $b_{1(n)}$

$$E_c^{B_n} = E_c^{B_{n-1}}(B_{n-1} \rightarrow B_n), \quad (20)$$

$$E_c^{b_{1(n)}} = E_c^{b_{1(n-1)}}(b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}). \quad (21)$$

Аналогичным образом из формул (14)–(16) получаются выражения для энергий взаимодействия  $E_{\text{int}}^{B_n - b_{1(n)}}$ ,  $E_{\text{int}}^{B_n - b_2}$  и  $E_{\text{int}}^{b_{1(n)} - b_2}$

$$E_{\text{int}}^{B_n - b_{1(n)}} = E_{\text{int}}^{B_{n-1} - b_{1(n-1)}}(B_{n-1} \rightarrow B_n, b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}, \varphi_{n-1} \rightarrow \varphi_n, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n, l_{1(n-1)} \rightarrow l_{1(n)}), \quad (22)$$

$$E_{\text{int}}^{B_n - b_2} = E_{\text{int}}^{B_{n-1} - b_2}(B_{n-1} \rightarrow B_n, \varphi_{n-1} \rightarrow \varphi_n, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n, l_{2(n-1)} \rightarrow l_{2(n)}), \quad (23)$$

$$E_{\text{int}}^{b_{1(n)} - b_2} = E_{\text{int}}^{b_{1(n-1)} - b_2}(b_{1(n-1)} \rightarrow b_{1(n)}, \alpha_{n-1} \rightarrow \alpha_n, l_{1(n-1)} \rightarrow l_{1(n)}, l_{2(n-1)} \rightarrow l_{2(n)}). \quad (24)$$

Для высоты энергетического барьера  $W_b$  из соображений размерности и порядка величины, а также с учетом того, что на один период  $h$  приходятся два тройных стыка, примем оценку

$$W_b = 2Gb_2^2 k, \quad (25)$$

где  $k$  — безразмерный подгоночный параметр.

Суммарная работа, совершаемая касательным напряжением  $\tau$  по перемещению четырех (на один период  $h$ ) скользящих зернограничных дислокаций, определяется выражением

$$E_\tau = \tau b_{1(n-1)}(l_{1(n-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{n-1} - \alpha_0) + \tau b_2(l_{2(n-1)} - \delta) \cos \alpha_0. \quad (26)$$

С помощью формул (7)–(26) составим разность  $\Delta W_n = W_n - W_{n-1}$  полных энергий дефектной системы. Условие  $\Delta W_n = 0$  позволяет найти критическое напряжение  $\tau_n^{\text{crit}}$ , которое необходимо для преодоления скользящими зернограничными дислокациями барьера  $W_b$  и

других барьеров, связанных со взаимодействием между дислокациями. Таким образом, находим

$$\tau_n^{\text{crit}} = - \frac{\tilde{W}_n - W_{n-1}}{b_{1(n-1)}(l_{1(n-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{n-1} - \alpha_0) + b_2(l_{2(n-1)} - \delta) \cos \alpha_0}, \quad (27)$$

где  $\tilde{W}_n = W_n - E_\tau$ .

### 3. Модель испускания решеточных дислокаций тройным стыком границ зерен

Постоянный рост вектора Бюргерса разностной дислокации приводит к значительному увеличению энергии дефектной системы. Естественным процессом релаксации зернограничной структуры может служить расщепление разностной дислокации на некоторую остаточную зернограничную дислокацию и решеточную дислокацию, способную двигаться внутри одного из прилегающих к тройному стыку зерен вдоль существующих плоскостей скольжения. Такой процесс релаксации представляет собой испускание тройным стыком границ зерен полной или частичной дислокации с вектором Бюргерса, лежащим в одной из плоскостей скольжения. Испускание решеточной дислокации становится энергетически выгодным при достижении вектором Бюргерса разностной дислокации некоторой критической величины, несколько превышающей значение вектора Бюргерса испускаемой решеточной дислокации. Сравнительный расчет энергетических характеристик испускания из тройного стыка границ зерен полных и частичных дислокаций показал, что в рассмотренном диапазоне параметров дефектной системы энергетически наиболее выгодным является процесс испускания полных решеточных дислокаций.

Рассмотрим на примере тройного стыка  $AOB$  возможный сценарий дальнейшей эволюции зернограничной дефектной структуры после  $(n-1)$ -го элементарного акта зернограничного скольжения. К этому моменту в точке  $O$  тройного стыка границ зерен формируется разностная дислокация с вектором Бюргерса  $\mathbf{B}_{n-1}$  и происходит смещение тройного стыка на расстояние  $(n-1)b_2$  (рис. 2,  $a$ ). Предполагается, что после  $n$ -го элементарного акта зернограничного скольжения вектор Бюргерса  $\mathbf{B}_n$  разностной дислокации достиг критического значения, необходимого для испускания полной решеточной дислокации в одно из зерен, прилегающих к тройному стыку (рис. 2,  $c$ ). Величина вектора Бюргерса  $\mathbf{b}_e$  решеточной дислокации определяется из кристаллографии конкретного материала. Угол испускания  $\theta$  рассчитывается из условия наибольшей энергетической выгоды испускания дислокации вдоль направления, задаваемого этим углом. Испущенная решеточная дислокация пересекает зерно и останавливается у противоположной межзеренной границы. В тройном стыке остается некоторая разностная дислокация с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}'_n = \mathbf{B}_n - \mathbf{b}_e$ .

Рассмотрим энергетические характеристики первого испускания полной решеточной дислокации из тройного стыка границ зерен. Процесс испускания характеризуется энергиями (в расчете на один период  $h$  дефектной структуры)  $W_{n-1}$  до и  $W'_n$  после испускания (рис. 2,  $a$  и  $c$  соответственно). Такая трансформация дефектной системы является энергетически выгодной при выполнении условия  $\Delta W'_n = W'_n - W_{n-1} < 0$ .

Полная энергия дефектной системы  $W_{n-1}$  в состоянии  $n-1$  остается прежней и определяется выражением (7).

Полная энергия дефектной системы  $W'_n$  после испускания полной решеточной дислокации состоит из следующих слагаемых:

$$\begin{aligned} W'_n = & E_{\text{self}}^{b'_n} + E_{\text{self}}^{b_{1(n)}} + E_{\text{self}}^{b_2} + E_{\text{self}}^{b_e} + E_c^{b'_n} + E_c^{b_{1(n)}} + E_c^{b_2} \\ & + E_c^{b_e} + E_{\text{int}}^{b'_n - b_{1(n)}} + E_{\text{int}}^{b'_n - b_2} + E_{\text{int}}^{b_{1(n)} - b_2} + E_{\text{int}}^{b_e - b'_n} \\ & + E_{\text{int}}^{b_e - b_{1(n)}} + E_{\text{int}}^{b_e - b_2} + W_b + E'_\tau, \end{aligned} \quad (28)$$

где  $E_{\text{self}}^{b'_n}$ ,  $E_{\text{self}}^{b_{1(n)}}$ ,  $E_{\text{self}}^{b_2}$  и  $E_{\text{self}}^{b_e}$  — собственные упругие энергии соответственно бесконечного ряда диполей разностных дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}'_n$ , двух бесконечных рядов диполей скользящих зернограничных дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}_{1(n)}$  и  $\pm \mathbf{b}_2$  и бесконечного ряда диполей испущенных решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций;  $E_c^{b'_n}$ ,  $E_c^{b_{1(n)}}$ ,  $E_c^{b_2}$  и  $E_c^{b_e}$  — энергии дислокационных ядер соответственно разностных и скользящих зернограничных, а также решеточных дислокаций;  $E_{\text{int}}^{b'_n - b_{1(n)}}$  и  $E_{\text{int}}^{b'_n - b_2}$  — энергии упругого взаимодействия между рядом диполей разностных  $\pm \mathbf{b}'_n$ -дислокаций и соответственно двумя рядами диполей скользящих  $\pm \mathbf{b}_{1(n)}$ - и  $\pm \mathbf{b}_2$ -дислокаций;  $E_{\text{int}}^{b_{1(n)} - b_2}$  — энергия упругого взаимодействия между рядами диполей скользящих  $\pm \mathbf{b}_1$ - и  $\pm \mathbf{b}_2$ -дислокаций;  $E_{\text{int}}^{b_e - b'_n}$ ,  $E_{\text{int}}^{b_e - b_{1(n)}}$ ,  $E_{\text{int}}^{b_e - b_2}$  — энергии упругого взаимодействия ряда диполей испущенных решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций соответственно с рядом диполей разностных  $\pm \mathbf{b}'_n$ -дислокаций и двумя рядами диполей скользящих зернограничных  $\pm \mathbf{b}_{1(n)}$ - и  $\pm \mathbf{b}_2$ -дислокаций;  $W_b$  — энергетический барьер, который необходимо преодолеть зернограничным  $\mathbf{b}_2$ - и  $-\mathbf{b}_2$ -дислокациям для перехода через соответствующие тройные стыки;  $E'_\tau$  — работа, совершаемая внешним сдвиговым напряжением  $\tau$  по перемещению зернограничных дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}_{1(n-1)}$  и  $\pm \mathbf{b}_2$  соответственно на расстояния  $(l_{1(n-1)} - \delta)/2$  и  $(l_{2(n-1)} - \delta)/2$ , а также пары решеточных дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}_e$ .

Энергии  $E_{\text{self}}^{b_{1(n)}}$ ,  $E_{\text{self}}^{b_2}$ ,  $E_c^{b_{1(n)}}$ ,  $E_c^{b_2}$ ,  $E_{\text{int}}^{b_{1(n)} - b_2}$  и  $W_b$  даются соответственно формулами (19), (13), (21), (10), (24) и (25).

Выражения для энергий  $E_{\text{self}}^{b'_n}$ ,  $E_c^{b'_n}$ ,  $E_{\text{int}}^{b'_n - b_{1(n)}}$  и  $E_{\text{int}}^{b'_n - b_2}$  могут быть получены соответственно из формул (18), (20), (22) и (23) с помощью переобозначений

$$E_{\text{self}}^{b'_n} = E_{\text{self}}^{B_n}(B_n \rightarrow b'_n, \varphi_n \rightarrow -\psi_n), \quad (29)$$

$$E_c^{b'_n} = E_c^{B_n}(B_n \rightarrow b'_n), \quad (30)$$

$$E_{\text{int}}^{b'_n - b_{1(n)}} = E_{\text{int}}^{B_n - b_{1(n)}}(B_n \rightarrow b'_n, \varphi_n \rightarrow -\psi_n), \quad (31)$$

$$E_{\text{int}}^{b'_n - b_2} = E_{\text{int}}^{B_n - b_2}(B_n \rightarrow b'_n, \varphi_n \rightarrow -\psi_n), \quad (32)$$

где  $\psi_n$  — угол, задающий ориентацию вектора Бюргера  $\mathbf{b}'_n$ ;  $\psi_n = \arcsin \frac{b_e}{b'_n} \sin(\theta - \varphi_n) - \varphi_n$ ;  $b'_n$  — величина этого вектора;  $b'_n = \sqrt{B_n^2 + b_e^2 - 2B_n b_e \cos(\theta - \varphi_n)}$ .

На один период  $h$  дефектной системы приходятся две испущенные решеточные  $\mathbf{b}_e$ -дислокации. Вклад от ядер этих дислокаций определяется формулой

$$E_c^{b_e} = D b_e^2. \quad (33)$$

Собственная упругая энергия  $E_{\text{self}}^{b_e}$  бесконечного ряда диполей решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций (в расчете на один период  $h$ ) вычисляется аналогично собственной энергии (11) бесконечного ряда диполей разностных дислокаций. Для  $E_{\text{self}}^{b_e}$  получаем формулу

$$\begin{aligned} E_{\text{self}}^{b_e} = & \frac{D b_e^2}{2} \{ \cos^2 \theta [\Psi_1(y_e - r_{c_{e1}}) - \Psi_1(r_{c_{e1}}) \\ & + \Phi_-(x_e - r_{c_{e1}}, 0) - \Phi_-(r_{c_{e1}}, 0) + \Phi_+(x_e - r_{c_{e1}}, y_e) \\ & - \Phi_+(r_{c_{e1}}, y_e) + \Phi_+(x_e, y_e - r_{c_{e1}}) - \Phi_+(x_e, r_{c_{e1}})] \\ & + \sin^2 \theta [\Psi_1(y_e - r_{c_{e2}}) - \Psi_1(r_{c_{e2}}) + \Phi_+(x_e - r_{c_{e2}}, 0) \\ & - \Phi_+(r_{c_{e2}}, 0) + \Phi_-(x_e - r_{c_{e2}}, y_e) - \Phi_-(r_{c_{e2}}, y_e) \\ & + \Phi_-(x_e, y_e - r_{c_{e2}}) - \Phi_-(x_e, r_{c_{e2}})] \}, \end{aligned} \quad (34)$$

где  $r_{c_{e1}} \approx b_e \cos \theta$ ,  $r_{c_{e2}} \approx b_e \sin \theta$ ,  $x_e = x_0 - 2p_1 \cos \theta$ ,  $y_e = h - y_0 - 2p_1 \sin \theta$ .

Энергии взаимодействия  $E_{\text{int}}^{b_e - b'_n}$ ,  $E_{\text{int}}^{b_e - b_{1(n)}}$  и  $E_{\text{int}}^{b_e - b_2}$  рассчитываются аналогично формулам (14) и (15), что дает

$$\begin{aligned} E_{\text{int}}^{b_e - b'_n} = & 2D b'_n b_e \{ \cos \psi_n \cos \theta \\ & \times [\Phi_+(x'_0 - x_0, y'_0 + y_0) - \Phi_+(x'_0, y'_0)] \\ & - \sin \psi_n \sin \theta [\Phi_-(x'_0 - x_0, y'_0 + y_0) - \Phi_-(x'_0, y'_0)] \\ & + \sin(\theta - \psi_n) [\Psi_2(x'_0 - x_0, y'_0 + y_0) - \Psi_2(x'_0, y'_0)] \}, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} E_{\text{int}}^{b_e - b_{1(n)}} = & 2D b_e b_{1(n)} \{ \cos \theta \cos(\alpha_n - \alpha_0/2) \\ & \times [\Phi_+(x'_1, R_2 + y'_1) - \Phi_+(R_1 - x'_1, y'_1)] \\ & + \sin \theta \sin(\alpha_n - \alpha_0/2) [\Phi_-(x'_1, R_2 + y'_1) \\ & - \Phi_-(R_1 - x'_1, y'_1)] + \sin(\theta + \alpha_n - \alpha_0/2) \\ & \times [\Psi_2(R_1, R_2 + y'_1) + \Psi_2(R_1 - x'_1, y'_1)] \}, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned}
 E_{\text{int}}^{b_e-b_2} &= 2Db_e b_2 \{ \cos \theta \cos(\alpha_0/2) \\
 &\times [\Phi_+(x'_2, R_4 + y'_2) - \Phi_+(R_3 - x'_2, y'_2)] \\
 &+ \sin \theta \sin(\alpha_0/2) [\Phi_-(x'_2, R_4 + y'_2) \\
 &- \Phi_-(R_3 - x'_2, y'_2)] + \sin(\alpha_0/2 - \theta) \\
 &\times [\Psi_2(R_3, R_4 + y'_2) + \Psi_2(R_3 - x'_2, y'_2)] \}, \quad (37)
 \end{aligned}$$

где  $x'_0 = p_1 \cos \theta$ ,  $x'_1 = x_1 - p_1 \cos \theta$ ,  $x'_2 = x_2 - p_1 \cos \theta$ ,  $y'_0 = p_1 \sin \theta$ ,  $y'_1 = y_1 - p_1 \sin \theta$ ,  $y'_2 = y_2 + p_1 \sin \theta$ .

Работа  $E'_\tau$  внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  по перемещению зернограничных и решеточных дислокаций, которые приходятся на один период  $h$ , записывается следующим образом:

$$\begin{aligned}
 E'_\tau &= \tau b_{1(n-1)}(l_{1(n-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{n-1} - \alpha_0) \\
 &+ \tau b_2(l_{2(n-1)} - \delta) \cos \alpha_0 - 2\tau b_e p_1 \cos 2\theta. \quad (38)
 \end{aligned}$$

Здесь  $p_1$  — расстояние, которое проходит испущенная  $\mathbf{b}_e$ -дислокация.

С помощью формул (7) и (28) составим разность  $\Delta W'_n = W'_n - W_{n-1}$  полных энергий дефектной системы после и до испускания ряда диполей решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций. Построим зависимости  $\Delta W'_n$  от расстояния  $p_1$ , пройденного испущенными решеточными  $\mathbf{b}_e$ -дислокациями, для нанокристаллического алюминия. Модуль сдвига  $G$  и коэффициент Пуассона  $\nu$  равны соответственно 26.5 GPa и 0.34 [32]. За величины  $b_{1(n)}$  и  $b_2$  векторов Бюргера зернограничных дислокаций примем характерное значение 0.1 nm [33]. Величины векторов Бюргера полной решеточной дислокации и краевой компоненты частичной дислокации следуют из кристаллографии ГЦК решетки чистого алюминия и соответственно равны  $b_e \approx 0.287$  nm,  $b'_e \approx 0.144$  nm [32]. Для размера зерна примем следующую оценку:  $d \approx l = 100$  nm. Пусть плечо  $\delta$  диполей зернограничных дислокаций будет равно 5 nm, а угол  $\theta$  испускания решеточной дислокации —  $5^\circ$ . В случае испускания частичной дислокации в формулу (28) следует добавить слагаемое  $E_\gamma = p_1 \gamma$ , связанное с энергией дефекта упаковки, который возникает за частичной  $b'_e$ -дислокацией. Для величины энергии дефекта упаковки используем оценку  $\gamma = 120$  mJ/m<sup>2</sup>, которая соответствует верхней границе расчетной  $\gamma$  (от 104 до 122 mJ/m<sup>2</sup>) и нижней границе измеренной экспериментально  $\gamma$  (от 120 до 142 mJ/m<sup>2</sup>) в чистом алюминии [34].

На рис. 3 представлены результаты расчета зависимостей  $\Delta W'_n(p_1)$  для полных (сплошные линии) и частичных (штриховые линии) дислокаций при различных значениях начального угла раствора тройного стыка  $\alpha_0 = 120^\circ$  (1),  $140^\circ$  (2) и  $160^\circ$  (3). Эти кривые строились на шаге  $n$  зернограничной деформации, когда мощность вектора Бюргера разностной дислокации  $B_n$  достигала некоторого критического значения  $B_n = B_n^{\text{crit}}$ . Для всех кривых  $B_n^{\text{crit}} \approx 0.3$  nm. Как видно из рис. 3, в указанном диапазоне параметров модельной системы (главным

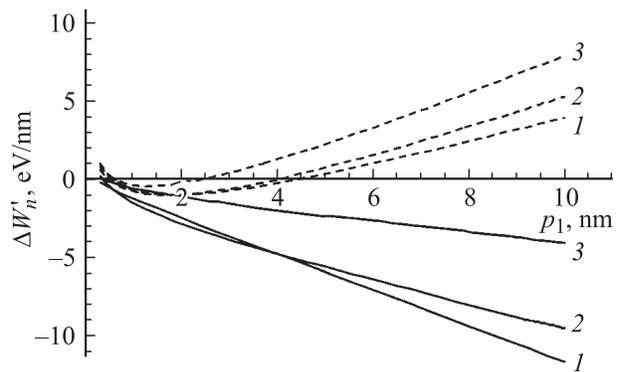


Рис. 3. Зависимости разности полных энергий  $\Delta W'_n$  от расстояния  $p_1$  для полных (сплошные линии) и частичных (штриховые линии) решеточных дислокаций при различных значениях угла  $\alpha_0 = 120^\circ$  (1),  $140^\circ$  (2) и  $160^\circ$  (3).

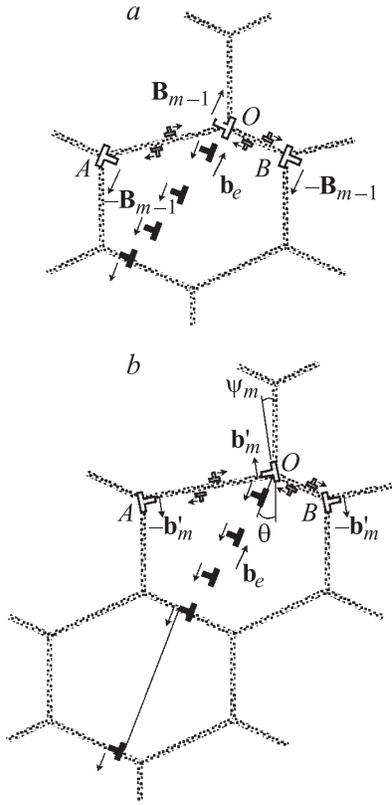
образом при выбранном размере зерна  $d = 100$  nm) испускание полных решеточных дислокаций энергетически более выгодно, чем испускание частичных. Это согласуется с результатами наших предыдущих расчетов условий зарождения полных и частичных решеточных дислокаций на зернограничных дисклинациях [35]. При  $B_n < 0.3$  nm испускание как частичных, так и полных дислокаций оказывается энергетически невыгодным.

Как уже отмечалось, после испускания полная решеточная дислокация пересекает зерно и захватывается его противоположной границей. В рамках модели процесс пересечения зерна полной решеточной дислокацией рассматривается как элементарный акт решеточного скольжения, которое вместе с зернограничным скольжением вносит вклад в общую пластическую деформацию образца.

После первого испускания полной решеточной дислокации происходит повторное накопление мощности разностной дислокации. Когда ее вектор Бюргера достигает некоторого нового критического значения, процесс испускания решеточной дислокации повторяется. В предлагаемой модели вторая испущенная  $\mathbf{b}_e$ -дислокация скользит внутри зерна вдоль плоскости скольжения под углом  $\theta$ , но не достигает противоположной межзеренной границы из-за упругого взаимодействия с первой решеточной  $\mathbf{b}_e$ -дислокацией. Вторая  $\mathbf{b}_e$ -дислокация отталкивается первой и занимает некоторое равновесное положение  $p_2$  в теле зерна.

Затем процесс испускания полных решеточных  $\mathbf{b}_e$ -дислокаций из тройных стыков зерен многократно повторяется. Каждая последующая  $\mathbf{b}_e$ -дислокация проходит все меньшее расстояние  $p_i$  внутри зерна, встречая сильное противодействие со стороны ранее испущенных дислокаций. При каждом испускании  $\mathbf{b}_e$ -дислокации ранее испущенные дислокации несколько продвигаются вперед, перемещаясь в новые равновесные положения.

В результате в материале формируется новая дефектная структура, представляющая собой зерна, пересеченные скоплениями решеточных  $\mathbf{b}_e$ -дислокаций (рис. 4, а).



**Рис. 4.** Образование скопления решеточных дислокаций (а) и испускание решеточной дислокации из границы зерна (b).

Со временем наступает момент, когда испускание очередной решеточной дислокации становится невозможным из-за высокого энергетического барьера, созданного уже накопленными  $\mathbf{b}_e$ -дислокациями. В модели предполагается, что к этому моменту отталкивающее действие на первую испущенную  $\mathbf{b}_e$ -дислокацию со стороны остальных  $\mathbf{b}_e$ -дислокаций достигает критического значения и первая  $\mathbf{b}_e$ -дислокация проходит сквозь границу зерна в тело следующего зерна (рис. 4, b). Считается, что эта дислокация целиком испускается из границы и движется внутри зерна до следующей межзеренной границы.

Уход первой  $\mathbf{b}_e$ -дислокации позволяет испустить очередную решеточную дислокацию. При этом вторая  $\mathbf{b}_e$ -дислокация доходит до границы зерна. Испускание следующей решеточной дислокации опять оказывается энергетически невыгодным. Предполагается, что снова происходит испускание второй  $\mathbf{b}_e$ -дислокации в тело следующего зерна.

Таким образом, с этого момента каждое последующее испускание полной решеточной дислокации из тройного стыка границ зерен сопровождается испусканием решеточной дислокации, которая достигла границы, в прилегающее зерно. В результате в следующем зерне также образуется скопление  $\mathbf{b}_e$ -дислокаций.

Рассмотрим энергетические характеристики  $k$ -го испускания полной решеточной дислокации. Испускание

$k$ -й дислокации из тройного стыка границ зерен сопровождается переходом дефектной системы из состояния с полной энергией  $W'_{m-1}$  в состояние с полной энергией  $W'_m$ , где  $m > n$ . Такой переход является энергетически выгодным при выполнении условия  $\Delta W'_m = W'_m - W'_{m-1} < 0$ .

Полная энергия дефектной системы  $W'_{m-1}$  в состоянии  $m-1$  представляется следующим набором слагаемых:

$$W'_{m-1} = E_{\text{self}}^{B_{m-1}} + E_{\text{self}}^{b_{1(m-1)}} + E_{\text{self}}^{b_2} + E_{\text{self}\Sigma}^{b_e} + E_c^{B_{m-1}} + E_c^{b_{1(m-1)}} + E_c^{b_2} + E_{c\Sigma}^{b_e} + E_{\text{int}}^{B_{m-1}-b_{1(m-1)}} + E_{\text{int}}^{B_{m-1}-b_2} + E_{\text{int}}^{b_{1(m-1)}-b_2} + E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-B_{m-1}} + E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_{1(m-1)}} + E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_2} + E_{\text{int}\Sigma}^{b_e}, \quad (39)$$

где  $E_{\text{self}\Sigma}^{b_e}$  — суммарная собственная упругая энергия  $k-1$  бесконечных рядов диполей решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций;  $E_{c\Sigma}^{b_e}$  — суммарная энергия  $2(k-1)$  дислокационных ядер испущенных решеточных  $\mathbf{b}_e$ -дислокаций;  $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-B_{m-1}}$ ,  $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_{1(m-1)}}$  и  $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_2}$  — соответственно суммарные энергии упругого взаимодействия  $k-1$  бесконечных рядов диполей испущенных решеточных  $\mathbf{b}_e$ -дислокаций с бесконечным рядом диполей разностных  $\pm B_{m-1}$ -дислокаций и двумя бесконечными рядами диполей скользящих зернограницных  $\pm b_{1(m-1)}$ - и  $\pm b_2$ -дислокаций;  $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e}$  — суммарная энергия упругого взаимодействия между  $k-1$  бесконечными рядами диполей испущенных решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций.

Все энергии в формуле (39) без знака суммы  $\Sigma$  совпадают с формулами, которые были рассчитаны выше.

После испускания  $(k-1)$ -го ряда диполей  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций на один период  $h$  дефектной системы приходится  $2(k-1)$  решеточных дислокаций, энергия ядер которых определяется формулой

$$E_{c\Sigma}^{b_e} = 2(k-1)Db_b^2. \quad (40)$$

Формулы для собственной энергии  $E_{\text{self}\Sigma}^{b_e}$  и энергий взаимодействия  $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-B_{m-1}}$ ,  $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_{1(m-1)}}$  и  $E_{\text{int}\Sigma}^{b_e-b_2}$  получаются в результате суммирования выражений, аналогичных (34)–(37), что дает

$$E_{\text{int}\Sigma}^{b_e} = \sum_{i=1}^{k-1} \frac{Db_b^2}{2} \left\{ \cos^2 \theta [\Psi_1(y_{ei} - r_{c_{e1}}) - \Psi_1(r_{c_{e1}})] + \Phi_-(x_{ei} - r_{c_{e1}}, 0) - \Phi_-(r_{c_{e1}}, 0) + \Phi_+(x_{ei} - r_{c_{e1}}, y_{ei}) - \Phi_+(r_{c_{e1}}, y_{ei}) + \Phi_+(x_{ei}, y_{ei} - r_{c_{e1}}) - \Phi_+(x_{ei}, r_{c_{e1}})] + \sin^2 \theta [\Psi_1(y_{ei} - r_{c_{e2}}) - \Psi_1(r_{c_{e2}}) + \Phi_+(x_{ei} - r_{c_{e2}}, 0) - \Phi_+(r_{c_{e2}}, 0) + \Phi_-(x_{ei} - r_{c_{e2}}, y_{ei}) - \Phi_-(r_{c_{e2}}, y_{ei}) + \Phi_-(x_{ei}, y_{ei} - r_{c_{e2}}) - \Phi_-(x_{ei}, r_{c_{e2}})] \right\}, \quad (41)$$

где  $x_{ei} = x_{0i} - 2p_i \cos \theta$ ,  $y_{ei} = h - y_{0i} - 2p_i \sin \theta$ ,  $x_{0i}$  и  $y_{0i}$  — геометрические характеристики тройного стыка

границ зерен, из которого была испущена  $i$ -я решеточная дислокация;

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - B_{m-1}} = \sum_{i=1}^{k-1} 2Db'_n b_e \{ \cos \varphi_{m-1} \cos \theta \times [\Phi_+(x'_{0i} - x_0, y'_{0i} + y_0) - \Phi_+(x'_{0i}, y'_{0i})] + \sin \varphi_{m-1} \sin \theta [\Phi_-(x'_{0i} - x_0, y'_{0i} + y_0) - \Phi_-(x'_{0i}, y'_{0i})] + \sin(\varphi_{m-1} + \theta) [\Psi_2(x'_{0i} - x_0, y'_{0i} + y_0) - \Psi_2(x'_{0i}, y'_{0i})] \}, \quad (42)$$

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m-1)}} = \sum_{i=1}^{k-1} 2Db_e b_{1(m-1)} \{ \cos \theta \cos(\alpha_{m-1} - \alpha_0/2) \times [\Phi_+(x'_{1i}, R_2 + y'_{1i}) - \Phi_+(R_1 - x'_{1i}, y'_{1i})] + \sin \theta \sin(\alpha_{m-1} - \alpha_0/2) [\Phi_-(x'_{1i}, R_2 + y'_{1i}) - \Phi_-(R_1 - x'_{1i}, y'_{1i})] + \sin(\theta + \alpha_{m-1} - \alpha_0/2) \times [\Psi_2(R_1, R_2 + y'_{1i}) + \Psi_2(R_1 - x'_{1i}, y'_{1i})] \}, \quad (43)$$

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2} = \sum_{i=1}^{k-1} 2Db_e b_2 \{ \cos \theta \cos(\alpha_0/2) \times [\Phi_+(x'_{2i}, R_4 + y'_{2i}) - \Phi_+(R_3 - x'_{2i}, y'_{2i})] + \sin \theta \sin(\alpha_0/2) [\Phi_-(x'_{2i}, R_4 + y'_{2i}) - \Phi_-(R_3 - x'_{2i}, y'_{2i})] + \sin(\alpha_0/2 - \theta) \times [\Psi_2(R_3, R_4 + y'_{2i}) + \Psi_2(R_3 - x'_{2i}, y'_{2i})] \}, \quad (44)$$

где  $x'_{0i} = p_i \cos \theta - (m-1-n_i)b_2 \cos(\alpha_0/2)$ ,  $x'_{1i} = x_1 + (m-1-n_i)b_2 \cos(\alpha_0/2) - p_i \cos \theta$ ,  $x'_{2i} = x_2 + (m-1-n_i) \times b_2 \cos(\alpha_0/2) - p_i \cos \theta$ ,  $y'_{0i} = p_i \sin \theta + (m-1-n_i)b_2 \times \sin(\alpha_0/2)$ ,  $y'_{1i} = y_1 - (m-1-n_i)b_2 \sin(\alpha_0/2) - p_i \sin \theta$ ,  $y'_{2i} = y_2 + (m-1-n_i)b_2 \sin(\alpha_0/2) + p_i \sin \theta$ , а  $n_i$  — номер элементарного акта зернограничного скольжения, на котором произошло испускание  $i$ -й решеточной дислокации.

Энергия взаимодействия  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e}$  вычисляется как сумма всех парных взаимодействий бесконечных рядов диполей решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e} = \sum_{i=1}^{k-2} \sum_{j=i+1}^{k-1} 2Db_e^2 \{ \cos^2 \theta [\Phi_+(x_{0i} - x'_{0ij}, h - y_{0i} - y'_{0ij}) - \Phi_+(x'_{0ij}, y'_{0ij})] + \sin^2 \theta [\Phi_-(x_{0i} - x'_{0ij}, h - y_{0i} - y'_{0ij}) - \Phi_-(x'_{0ij}, y'_{0ij})] + \sin 2\theta [\Psi_2(x_{0i} - x'_{0ij}, h - y_{0i} - y'_{0ij}) + \Psi_2(x'_{0ij}, y'_{0ij})] \}, \quad (45)$$

где  $x'_{0ij} = p_i \cos \theta - p_j \cos \theta - (n_j - n_i) \cos(\alpha_0/2)$ ,  $y'_{0ij} = p_i \sin \theta - p_j \sin \theta + (n_j - n_i) \sin(\alpha_0/2)$ .

Полная энергия дефектной системы  $W'_m$  после испускания  $k$ -й решеточной дислокации имеет следующий вид

$$W'_m = E_{\text{self}}^{b'_m} + E_{\text{self}}^{b_{1(m)}} + E_{\text{self}}^{b_2} + E_{\text{self}}^{b_e} + E_c^{b'_m} + E_c^{b_{1(m)}} + E_c^{b_2} + E_{c\Sigma}^{b_e} + E_{\text{int } \Sigma}^{b'_m - b_{1(m)}} + E_{\text{int } \Sigma}^{b'_m - b_2} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_{1(m)} - b_2} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b'_m} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m)}} + E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2} + W_b + E'_\tau, \quad (46)$$

где  $E_{\text{self } \Sigma}^{b_e}$  — суммарная собственная упругая энергия  $k$  бесконечных рядов диполей решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций;  $E_{c\Sigma}^{b_e}$  — суммарная энергия  $2k$  дислокационных ядер испущенных решеточных  $\mathbf{b}_e$ -дислокаций;  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b'_m}$ ,  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m)}}$  и  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2}$  — соответственно суммарные энергии упругого взаимодействия  $k$  бесконечных рядов диполей испущенных решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций с бесконечным рядом диполей разностных  $\pm \mathbf{b}'_m$ -дислокаций и двумя бесконечными рядами диполей скользящих зернограничных  $\pm \mathbf{b}_{1(m)}$ - и  $\pm \mathbf{b}_2$ -дислокаций;  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e}$  — суммарная энергия упругого взаимодействия между  $k$  бесконечными рядами диполей испущенных решеточных  $\pm \mathbf{b}_e$ -дислокаций.

Все энергии в формулах (39) и (46) без значка суммы  $\Sigma$  совпадают с формулами, которые были рассчитаны выше.

Выражения для энергий  $E_{c\Sigma}^{b_e}$ ,  $E_{\text{self } \Sigma}^{b_e}$ ,  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b'_m}$ ,  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m)}}$ ,  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2}$  и  $E_{\text{int } \Sigma}^{b_e}$  легко получить соответственно из формул (40)–(45), сделав следующие замены:

$$E_{c\Sigma}^{b_e} = E_{c\Sigma}^{b_e}(k-1 \rightarrow k),$$

$$E_{\text{self } \Sigma}^{b_e} = E_{\text{self } \Sigma}^{b_e}(k-1 \rightarrow k),$$

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b'_m} = E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - B_{m-1}}(k-1 \rightarrow k, B_{m-1} \rightarrow b'_m, \varphi_{m-1} \rightarrow -\psi_m),$$

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m)}} = E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_{1(m-1)}}(k-1 \rightarrow k, b_{1(m-1)} \rightarrow b_{1(m)}),$$

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2} = E_{\text{int } \Sigma}^{b_e - b_2}(k-1 \rightarrow k),$$

$$E_{\text{int } \Sigma}^{b_e} = E_{\text{int } \Sigma}^{b_e}(k-1 \rightarrow k).$$

Работа  $E'_\tau$  внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  по перемещению зернограничных и  $k$ -х испущенных решеточных дислокаций, которые приходятся на один период  $h$ , записывается следующим образом:

$$E'_\tau = \tau b_{1(m-1)}(l_{1(m-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{m-1} - \alpha_0) + \tau b_2(l_{2(m-1)} - \delta) \cos \alpha_0 - 2\tau b_e p_k \cos 2\theta.$$

С помощью формул (39) и (46) составим разность  $\Delta W'_m = W'_m - W'_{m-1}$  полных энергий дефектной системы. Условие  $\Delta W'_m = 0$  позволяет найти критическое напряжение  $\tau_m^{\text{crit}}$ , определяющее переход системы из состояния  $m-1$  в состояние  $m$ , который характеризуется испусканием  $k$ -й решеточной дислокации. Таким образом, для  $\tau_m^{\text{crit}}$  имеем следующее выражение:

$$\tau_m^{\text{crit}} = - \frac{\tilde{W}'_m - W'_{m-1}}{b_{1(m-1)}(l_{1(m-1)} - \delta) \cos(2\alpha_{m-1} - \alpha_0) + b_2(l_{2(m-1)} - \delta) \cos \alpha_0 - 2b_e p_k \cos 2\theta},$$

где  $\tilde{W}'_m = W'_m - E'_\tau$ .

#### 4. Зависимость критического напряжения от деформации

Исследуем зависимость критического сдвигового напряжения  $\tau_n^{\text{crit}}$  от полной пластической деформации образца  $\varepsilon$ . В представленной модели действуют два механизма пластичности — зернограничное и решеточное дислокационное скольжение. Элементарным актом зернограничного скольжения считается прохождение пары скользящих зернограничных дислокаций через тройной стык границ зерен. За элементарный акт решеточного скольжения в масштабе зерна принимается пересечение зерна полной решеточной дислокацией, испущенной этим тройным стыком. Оценим вклады в полную деформацию от зернограничного скольжения как  $\varepsilon_{\text{gb}} \approx nb_2/d$  и

от решеточного скольжения как  $\varepsilon_1 \approx \sum_{i=1}^k b_e p_i/d^2$ . Полную деформацию образца оценим как  $\varepsilon = (1 + \lambda)(\varepsilon_{\text{gb}} + \varepsilon_1)$ , где  $\lambda$  — подгоночный параметр, который выбирается из условия согласия с экспериментом. Предполагается, что  $\lambda$  учитывает действие тех возможных деформационных механизмов (диффузионных, ротационных и т.д.), которые не были напрямую учтены в модели. Поскольку предполагается, что механизмы зернограничного и решеточного скольжения вносят основные вклады в  $\varepsilon$ , величина  $\lambda$  должна быть существенно (в разы) меньше единицы.

Рассмотрим зависимость  $\tau_n^{\text{crit}}(\varepsilon)$  на примере нанокристаллического алюминия. Начальный угол  $\alpha_0$  раствора тройных стыков положим равным  $160^\circ$ . Для параметра  $\lambda$  выберем значение 0.25. Остальные параметры дефектной системы выбираются такими же, как при построении зависимостей  $\Delta W_n'(p_1)$  для испускания первой решеточной дислокации (рис. 3).

Результаты численных расчетов зависимости  $\tau_n^{\text{crit}}(\varepsilon)$  представлены на рис. 5 в виде кривой  $\sigma(\varepsilon)$ , где  $\sigma = 2\tau_n^{\text{crit}}$ . Штриховой линией дана экспериментальная кривая [13]. Очевидно, что теоретическая кривая лежит в том же диапазоне значений, что и экспериментальная. Зубчатость теоретической кривой связана с вкладом в сверхпластическую деформацию решеточного скольжения. Каждый элементарный акт решеточного скольжения вызывает заметное падение величины критического напряжения, приводя к локальному разупрочнению.

Величина вклада решеточного скольжения в сверхпластическую деформацию полностью определяется частотой испускания решеточных дислокаций, которая в свою очередь задается скоростью накопления мощности разностной дислокации в тройном стыке зерен. Очевидно, что скорость роста вектора Бюргера разностной дислокации в стыках с относительно малыми углами раствора (порядка  $80\text{--}120^\circ$ ) выше, чем в стыках с большими углами раствора (порядка  $140\text{--}170^\circ$ ). Следовательно, вклад от решеточного скольжения в деформацию будет выше в зернах, имеющих тройные стыки с малыми углами раствора. Однако, как было показано в работах [30,31], зернограничное скольжение на стыках

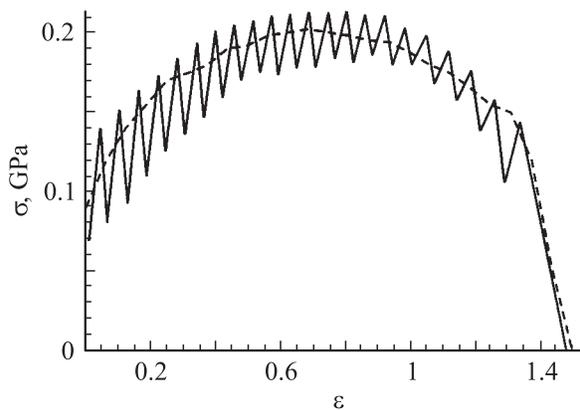


Рис. 5. Зависимость внешнего напряжения  $\sigma$  от общей пластической деформации  $\varepsilon$ .

с малыми углами раствора затруднено. Следовательно, зернограничное скольжение в первую очередь будет развиваться на тройных стыках с большими углами раствора, объемная доля которых достаточно высока из-за неравновесности структуры НКМ, обусловленной технологией их получения. Все это указывает на то, что в НКМ при сверхпластической деформации доминирующим механизмом деформации является зернограничное скольжение. Вклад от решеточного скольжения также имеет место, но он значительно меньше. В основном решеточное скольжение служит механизмом релаксации зернограничной структуры и сглаживает эффект упрочнения, связанный с ростом мощности разностной дислокации.

В рассмотренной модели вклад в полную деформацию ( $\varepsilon \approx 150\%$ ) от зернограничного скольжения составлял  $\varepsilon_{\text{gb}} \approx 90\%$ , а от решеточного скольжения —  $\varepsilon_1 \approx 30\%$  при начальном угле раствора тройного стыка  $\alpha_0 = 160^\circ$ .

Как уже отмечалось, трансформация зернограничных дислокаций на тройных стыках зерен приводит к смещению этих стыков, что сопровождается локальной миграцией границ зерен. Такой аккомодационный процесс ведет к увеличению угла раствора тройного стыка  $\alpha_n$ , который характеризует этот стык как геометрическое препятствие для зернограничного скольжения. В результате эффект упрочнения уменьшается. С ростом числа  $n$  элементарных актов зернограничного скольжения тройные стыки образуют периодическую структуру, состоящую из сближающихся друг с другом пар (например, стыки  $O$  и  $B$  на рис. 1). В пределе тройные стыки, входящие в эти пары, объединяются с образованием четвертного стыка. При этом разностные дислокации, находящиеся в этих стыках, аннигилируют. В результате можно получить периодическую конфигурацию четвертных стыков, лежащих в одной плоскости и соединенных прямыми границами. Вдоль этой плоскости скольжение зернограничных дислокаций осуществляется практически беспрепятственно. Таким образом, смещение тройных стыков, инициированное зернограничным

скольжением, и сопутствующая миграция границ зерен приводят к разупрочнению НКМ.

Механизм упрочнения, связанный с накоплением и ростом мощности разностных дислокаций в тройных стыках зерен, конкурирует с механизмом разупрочнения, связанным с миграцией тройных стыков и испусканием решеточных дислокаций. Именно эта конкуренция и определяет характер деформационных кривых в НКМ при сверхпластической деформации.

## Список литературы

- [1] K.A. Padmanabhan, G.J. Davies. *Superplasticity*. Berlin, Springer (1980).
- [2] И.И. Новиков, В.К. Портной. Сверхпластичность сплавов с ультрамелким зерном. *Металлургия, М.* (1981). 168 с.
- [3] О.А. Кайбышев. Сверхпластичность промышленных сплавов. *Металлургия, М.* (1984). 263 с.
- [4] J. Pilling, N. Ridley. *Superplasticity in Crystalline Solids*. London. The Institute of Metals (1989).
- [5] О.А. Кайбышев, Ф.З. Утяшев. Сверхпластичность, измельчение структуры и обработка труднодеформируемых сплавов. *Наука, М.* (2002). 438 с.
- [6] R.K. Islamgaliev, N.F. Yunusova, R.Z. Valiev, N.K. Tsenev, V.N. Perevezentsev, T.G. Langdon. *Scr. Mater.* **49**, 5, 467 (2003).
- [7] Z.Y. Ma, R.S. Mishra, M.W. Mahoney, R. Grimes. *Mater. Sci. Eng. A* **351**, 1/2, 148 (2003).
- [8] В.В. Шпейзман, М.М. Мышляев, М.М. Камалов, М.М. Мышляева. *ФТТ* **45**, 11, 2008 (2003).
- [9] А.А. Мазилкин, М.М. Камалов, М.М. Мышляев. *ФТТ* **46**, 8, 1416 (2004).
- [10] F. Musin, R. Kaibyshev, Y. Motohashi, G. Itoh. *Scr. Mater.* **50**, 5, 511 (2004).
- [11] K.A. Padmanabhan, H. Gleiter. *Mater. Sci. Eng. A* **361**, 1/2, 28 (2004).
- [12] R.K. Islamgaliev, R.Z. Valiev, R.S. Mishra, A.K. Mukherjee. *Mater. Sci. Eng. A* **304–306**, 1/2, 206 (2001).
- [13] R.S. Mishra, R.Z. Valiev, S.X. McFadden, R.K. Islamgaliev, A.K. Mukherjee. *Phil. Mag. A* **81**, 1, 37 (2001).
- [14] R.S. Mishra, V.V. Stolyarov, C. Echer, R.Z. Valiev, A.K. Mukherjee. *Mater. Sci. Eng. A* **298**, 1/2, 44 (2001).
- [15] A.K. Mukherjee. *Mater. Sci. Eng. A* **322**, 1/2, 1 (2002).
- [16] Р.З. Валиев, И.В. Александров. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. *Логос, М.* (2000). 272 с.
- [17] Ю.Р. Колобов, Р.З. Валиев, Г.П. Грабовецкая и др. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов. *Наука, Новосибирск* (2001). 232 с.
- [18] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Физическая механика деформированных наноструктур. Т. 1. Нанокристаллические материалы. *Янус, СПб* (2003). 194 с.
- [19] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials*. Springer, Berlin–Heidelberg–N.Y. (2004). 198 p.
- [20] F.A. Mohamed, Y. Li. *Mater. Sci. Eng. A* **298**, 1/2, 1 (2001).
- [21] R.A. Masumura, P.M. Hazzledine, C.S. Pande. *Acta Mater.* **46**, 13, 4527 (1998).
- [22] H.S. Kim, Y. Estrin, M.B. Bush. *Acta Mater.* **48**, 2, 493 (2000).
- [23] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, H. Gleiter. *Acta Mater.* **50**, 1, 61 (2002).
- [24] A.A. Fedorov, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Scr. Mater.* **47**, 1, 51 (2002).
- [25] M. Murayama, J.M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki. *Science* **295**, 5564, 2433 (2002).
- [26] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. *Acta Mater.* **51**, 14, 4059 (2003).
- [27] H. Hahn, K.A. Padmanabhan. *Phil. Mag. B* **76**, 4, 559 (1997).
- [28] D.A. Konstantinidis, E.C. Aifantis. *Nanostruct. Mater.* **10**, 7, 1111 (1998).
- [29] A.A. Fedorov, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **51**, 4, 887 (2003).
- [30] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, 12, L47 (2003).
- [31] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. *Acta Mater.* **52**, 6, 1711 (2004).
- [32] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. *Атомиздат, М.* (1972). 600 с.
- [33] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. *Interfaces in Crystalline Materials*. Clarendon Press, Oxford (1995).
- [34] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, H. Gleiter. *Acta Mater.* **50**, 20, 5005 (2002).
- [35] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. *ФТТ* **46**, 11, 1975 (2004).