# Утолщение искаженных деформацией большеугловых границ зерен в наноматериалах

© С.В. Бобылев<sup>1-3</sup>, И.А. Овидько<sup>1-3</sup>

07

 <sup>1</sup> Научно-исследовательская лаборатория "Механика новых наноматериалов", Санкт-Петербургский политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия
 <sup>2</sup> Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия
 <sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
 Е-mail: ovidko@nano.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 27 апреля 2015 г.)

Предложена теоретическая модель, которая описывает искаженные деформацией (неравновесные) большеутловые границы зерен в нанокристаллических и ультрамелкозернистых материалах. В рамках модели дислокационная структура таких границ представляется в виде комбинации стандартной стенки зернограничных дислокаций и захваченных из соседних зерен решеточных дислокаций (неравновесных дислокаций). Рассчитаны энергетические характеристики системы дефектов границы зерна. Показано, что утолщение границы за счет согласованного движения неравновесных дислокаций выгодно и осуществляется безбарьерно. Исследованы зависимости величины утолщения от различных параметров задачи, его типичные значения составляют величину порядка 1.5–2.5 nm, что согласуется с известными экспериментальными данными.

Работа выполнена за счет средств гранта Российского научного фонда (проект № 14-29-00199).

### 1. Введение

Нанокристаллические и ультрамелкозернистые материалы (далее наноматериалы) представляют собой новое поколение функциональных и структурных материалов, обладающих уникальными механическими, физическими и химическими свойствами (см., например, [1-6]). Наноматериалы являются предметом интенсивных научных исследований [1-11], что обусловлено их первостепенной значимостью для современных и будущих высоких технологий. В частности, наноматериалы характеризуются превосходными механическими свойствами, которые выгодно отличают их от обычных крупнозернистых поликристаллов с таким же химическим составом. Примером таких свойств являются высокие пределы текучести и прочности, высокая износостойкость, способность некоторых нанокристаллических металлов и сплавов к сверхпластической деформации [1-6]. Соответственно физика пластической деформации наноматериалов представляет собой предмет интенсивных научных исследований, которые мотивированы значительным потенциалом их практического применения и одновременно фундаментальным интересом к особым механизмам пластической деформации, действующим на наномасштабном уровне.

Уникальные свойства наноматериалов являются следствием размерных эффектов и наноструктуры, где исключительно важную роль в деформационных процессах играют межзеренные границы. Ввиду малости размера зерна границы зерен занимают значительную объемную долю материала и поэтому играют определяющую роль в формировании механических свойств. С другой стороны, обычные внутризеренные механизмы деформации, связанные с движением решеточных дислокаций, в значительной степени подавлены при малых размерах зерен. Как следствие, большинство механизмов пластической деформации в наноматериалах контролируется межзеренными границами [1–6]. Как следствие, изучение особенностей структуры межзеренных границ и их трансформаций представляется исключительно важным для понимания процессов, происходящих в наноматериалах при их деформировании.

Недавно в эксперименте [12] была выявлена интересная особенность: увеличение толщины (до 2-3 nm) искаженных деформацией (неравновесных) границ зерен в массивных ультрамелкозернистых металлических материалах, полученных методом интенсивной пластической деформации. Ранее нами была предложена теоретическая модель миграции искаженных деформацией (неравновесных) малоугловых границ зерен [11], где среди прочего было показано, что такие границы должны расширяться (увеличивать свою толщину) даже в случае отсутствия внешнего механического напряжения. Данный факт находит подтверждение в экспериментальных наблюдениях [12] утолщенных границ зерен в массивных ультрамелкозернистых материалах, изготовленных методом интенсивной пластической деформации. Однако в эксперименте [12] наблюдаются, как правило, большеугловые границы зерен с увеличенной толщиной, а наша предыдущая работа [11] касалась исключительно малоугловых границ. Основная цель настоящей работы — разработка теоретической модели, которая эффективно объясняет утолщение искаженных деформацией (неравновесных) большеугловых границ зерен в наноматериалах.

## 2. Утолщение искаженных деформацией большеугловых границ зерен: геометрические аспекты

Для описания процесса утолщения искаженных деформацией (неравновесных) большеугловых границ зерен в наноматериалах обобщим модель [11] на случай большеугловых границ зерен. В рамках подхода [11] неравновесная малоугловая граница зерна описывалась как комбинация "равновесных" и "неравновесных" дислокационных ансамблей. Первый ансамбль представляет собой обычную дислокационную стенку (симметричную границу наклона), тогда как второй ансамбль образован решеточными дислокациями, захваченными границей зерна в процессе пластической деформации и распределенными случайным образом вдоль плоскости границы. Аналогичное описание можно предложить и для случая большеугловой границы зерна. Используем для этого модель структурных единиц [13] для обычной (равновесной) большеугловой границы. В рамках этой модели граница образована периодически упорядоченными структурными единицами (атомными кластерами) двух типов (обозначим их  $\alpha$  и  $\beta$ ; см. рис. 1). Если, например, количество единиц  $\beta$  меньше, чем единиц  $\alpha$ , то единицы  $\beta$  называются минорными структурными единицами (minority structural units) и описываются как ядра периодически распределенных зернограничных дислокаций (рис. 1, b). Такие дислокации характеризуются векторами Бюргерса bgb (связанными с трансляционной симметрией границы зерна), модуль  $b_{\rm gb}$  которых обычно меньше модуля вектора Бюргерса b решеточных дислокаций и лежит в интервале b/4-b/3 [13]. В том случае, если единицы  $\beta$  (или  $\alpha$ ) полностью отсутствуют (рис. 1, а, с), угол разориентировки границы  $\theta_{\alpha}(\theta_{\beta})$  определяется исключительно геометрией структурной единицы  $\alpha(\beta)$ , и граница называется предпочтительной. На зависимости энергии границы зерна от угла разориентировки такой границе соответствует локальный минимум энергии. Однако в общем случае равновесная большеугловая граница состоит из единиц двух типов (рис. 1, b), а ее угол разориентировки задается как  $\theta = \theta_{\alpha} + \Delta \theta_{\beta}$ , где  $\Delta \theta_{\beta}$  — вклад, обеспечиваемый зернограничными дислокациями (единицы β) в суммарную разориентировку границы [13]. Угол Δθ<sub>β</sub> связан с периодом h зернограничных дислокаций и величиной их вектора Бюргерса bgb следующим соотношением:

$$\Delta \theta_{\beta} = 2 \arctan(b_{\rm gb}/2h). \tag{1}$$



**Рис. 1.** Модель структурных единиц большеугловой границы (схематично). a — граница зерна образована только структурными единицами  $\alpha$ ; b — граница зерна состоит из структурных единиц двух типов  $\alpha$  и  $\beta$  (зернограничные дислокации связаны со структурными единицами  $\beta$ ); c — граница зерна состоит только из структурных единиц  $\beta$ .

Используем теперь описанную выше модель как основу для модели искаженной деформацией большеугловой границы зерна в нанокристаллическом материале (рис. 2). Рассмотрим границу АВ длиной *d* в некотором фрагменте нанокристаллической структуры (рис. 2, а). Пусть эта граница образована структурными единицами двух типов, т.е. в соответствии с изложенным выше содержит периодическую стенку зернограничных дислокаций, характеризующихся вектором Бюргерса b<sub>gb</sub>. Теперь в духе модели малоугловой границы [11] будем считать, что искаженная деформацией большеугловая граница также содержит неравновесные решеточные дислокации противоположных знаков  $\pm \mathbf{b}$  (рис. 2, *b*), захваченные из соседних зерен и распределенные случайным образом вдоль плоскости границы. Так же как и в модели [11], будем предполагать, что количество положительных и отрицательных неравновесных дислокаций одинаково, так что эти дислокации не влияют на среднюю разориентировку границы зерна, обеспечивая лишь локальные ее флуктуации около среднего значения  $\theta$ .

Прочие границы зерна (GB1–GB4), прилегающие к тройным стыкам A и B, полагаются симметричными границами наклона. Однако для простоты мы не будем рассматривать их дислокационную структуру и для учета их влияния на процесс миграции границы ABиспользуем дисклинационную модель [14], согласно которой оборванная с одного конца симметричная граница наклона может быть приближенно представлена как клиновая дисклинация с мощностью, равной



**Рис. 2.** Модель утолщения искаженной деформацией большеугловой границы зерна со случайно распределенными неравновесными дислокациями. *a* — фрагмент нанокристаллического образца (общий вид), *b* — исходное состояние. Неравновесная граница зерна *AB* моделируется как комбинация стенки зернограничных дислокаций (темные дислокационные значки) и "неравновесной" структуры из положительных и отрицательных решеточных дислокаций (светлые дислокационные значки). Влияние соседних границ зерен (GB1–GB4) описывается дисклинационным диполем *AB* (детали см. в тексте). *с* — расширенная конфигурация границы зерна, в которой отрицательные неравновесные дислокации синхронно смещаются на расстояние  $\Delta l$  из исходного положения.

углу разориентировки границы зерна. Если предположить, что изначально стыки А и В являются полностью скомпенсированными (т.е. сумма углов разориентировки границ зерен, сходящихся в этом стыке, равна нулю), то угол разориентировки  $\theta$  границы AB равен сумме углов разориентировки остальных двух границ с противоположным знаком. Таким образом, в эквивалентном дисклинационном представлении влияние границ GB1-GB4 представляется в виде диполя клиновых дисклинаций с мощностями  $\pm \omega_0$ , где  $\omega_0 = \theta$ . Поскольку угол разориентировки  $\theta$  границы AB складывается из двух частей, определяемых структурными единицами  $\alpha$  и  $\beta$  ( $\theta = \theta_{\alpha} + \Delta \theta_{\beta}$ ), дисклинационный диполь можно аналогично представить в виде суммы двух диполей:  $\omega_0 = \omega_{\alpha} + \omega_{\beta}$ , где  $\omega_{\alpha} = \theta_{\alpha}$  и  $\omega_{\beta} = \Delta \theta_{\beta}$ . В рамках нашей модели, однако, часть границы АВ, представляемая структурными единицами а, является полностью статичной и никак не изменяется в процессе трансформации, которая описывается далее. Поле напряжений структуры а полностью компенсирует поле напряжений диполя  $\omega_{\alpha}$ , так что прочие дефекты (зернограничные и неравновесные дислокации) с ним не взаимодействуют. Как следствие, при расчете взаимодействия с границами GB1-GB4 достаточно учитывать вклад  $\omega_{\beta} = \Delta \theta_{\beta}$ , т.е. упругие поля напряжений, создаваемые этими границами, моделируются диполем клиновых дисклинаций, расположенных в стыках A и B и характеризующихся мощностью  $\pm \omega_{\beta}$ (рис. 2, b).

## Утолщение искаженных деформацией большеугловых границ зерен: энергетические характеристики

Теоретический анализ в [11] показал, что в неравновесных малоугловых границах даже в отсутствие приложенных механических напряжений энергетически выгодной является утолщенная конфигурация границы, когда отрицательные неравновесные дислокации коллективно смещаются из исходной плоскости границы подобно тому, как показано на рис. 2, *c*. Далее продемонстрировано, что утолщенная конфигурация на рис. 2, *c* в случае большеугловой границы также энергетически выгоднее исходной конфигурации границы (рис. 2, *b*). При этом, как и в [11], предполагаем, что неравновесные дислокации смещаются синхронно в виде плоской стенки и их положение можно описать одним параметром  $\Delta l$ , характеризующим утолщение большеугловой границы зерна (рис. 2, *c*).

Для этого запишем изменение полной энергии системы  $\Delta W$  в результате такого процесса. Из рис. 2, *с* следует, что в процессе описываемой трансформации претерпевают изменения энергии взаимодействия отрицательных неравновесных дислокаций с дисклинационным диполем *AB* и со всеми прочими дислокациями (зернограничными и положительными неравновесными, которые остаются на исходных позициях). Отсюда вели-

Δ

чину  $\Delta W$  можно записать в следующем виде:

$$W = \sum_{i=1}^{n/2} \sum_{j=1}^{k} W^{d-d} (-b, b_{gb}, \Delta l, y_{j}^{(gb)} - y_{i}^{(-)}) + \sum_{i=1}^{n/2} \sum_{j=1}^{n/2} W^{d-d} (-b, b, \Delta l, y_{j}^{(+)} - y_{i}^{(-)}) + \sum_{i=1}^{n/2} W^{\Delta-d} (-b, \Delta l, y_{i}^{(-)}) - \sum_{i=1}^{n/2} \sum_{j=1}^{k} W^{d-d} (-b, b_{gb}, 0, y_{j}^{(gb)} - y_{i}^{(-)}) - \sum_{i=1}^{n/2} \sum_{j=1}^{n/2} W^{d-d} (-b, b, 0, y_{j}^{(+)} - y_{i}^{(-)}) - \sum_{i=1}^{n/2} W^{\Delta-d} (-b, 0, y_{i}^{(-)}).$$
(2)

Здесь  $W^{d-d}(b_1, b_2, x_i - x_j, y_i - y_j)$  — энергия взаимодействия двух краевых дислокаций (с параллельными векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$ ), находящихся в точках с координатами  $(x_i, y_i)$  и  $(x_i, y_i)$  соответственно (здесь и далее используется система координат, изображенная на рис. 2, c);  $W^{\Delta-d}(b, x_i, y_i)$  — энергия взаимодействия между дисклинационным диполем и дислокацией с вектором Бюргерса b (перпендикулярным оси диполя), находящейся в точке с координатами  $(x_i, y_i)$ ; *п* — количество неравновесных дислокаций (это число четное, так как предполагается, что число положительных и отрицательных неравновесных дислокаций одинаково); k — количество зернограничных дислокаций;  $y_i^{(gb)} = ih - y$ -координата *i*-й зернограничной дислокации  $(i = 1, 2, ..., k); y_i^{(+)}$  и  $y_i^{(-)} - y$ -координаты положительных и отрицательных неравновесных дислокаций (*i* = 1, 2, ..., *n*/2). Нумерация дислокаций в формуле (2) идет от стыка В (рис. 2) и является раздельной для зернограничных, положительных и отрицательных неравновесных дислокаций. С учетом того, что зернограничные дислокации распределены периодически (с периодом h), из элементарных геометрических соображений их количество k выражается следующим образом:

$$k = [d/h]. \tag{3}$$

Здесь нотация [x] обозначает целую часть x. Число n неравновесных дислокаций в рамках нашей модели задается произвольно.

Энергии  $W^{d-d}(b_1, b_2, x_i - x_j, y_i - y_j), W^{\Delta-d}(b, x_i, y_i)$  хорошо известны (см., например, [14,15]) и записывают-



**Рис. 3.** Зависимость изменения энергии  $\Delta W$  от смещения  $\Delta l$  отрицательных неравновесных дислокаций (утолщения границы зерна), рассчитанная на примере алюминия для следующих значений параметров задачи:  $b_{\rm gb} = b/3$ ,  $h = 10b_{\rm gb}$ , d = 40 nm.

ся в виде:

$$W^{a-a}(b_1, b_2, x_i - x_j, y_i - y_j) = Db_1b_2$$

$$\times \left( \ln \frac{R}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}} - \frac{(y_i - y_j)^2}{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \right),$$

$$W^{\Delta - d}(b, x_i, y_i) = D\omega_{\beta}b$$
(4)

$$\times \left[ (y_i - d) \ln \frac{R}{\sqrt{x_i^2 + (y_i - d)^2}} - y_i \ln \frac{R}{\sqrt{x_i^2 + y_i^2}} \right],$$

(5)

где  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ , G — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона, R — радиус экранирования упругих напряжений дислокационных и дисклинационных дефектов. С учетом (1) и того факта, что мощность  $\omega_{\beta} = \Delta \theta_{\beta}$ , можно выразить мощность дисклинационного диполя через период стенки зернограничных дислокаций h и модуль вектора Бюргерса  $b_{\rm gb}$  как  $\omega_{\beta} = 2 \arctan(b_{\rm gb}/2h)$ .

Таким образом, мы нашли все необходимое (выражения (2)-(5)) для вычисления изменения энергии  $\Delta W$ . Окончательное выражение ввиду его громоздкости здесь не приводится.

Далее выполнен расчет энергии  $\Delta W$  на примере алюминия. Для этого материала характерны следующие значения параметров [15]: G = 73 GPa,  $\nu = 0.34$ , b = 0.25 nm. На рис. 3 приведена характерная зависимость  $\Delta W(\Delta l)$ , рассчитанная для параметров задачи:  $b_{gb} = b/3$ ,  $h = 20b_{gb}$ , d = 40 nm. (В формулы (4) и (5) входит еще радиус экранирования R, но, используя (2), можно показать, что изменение энергии  $\Delta W$  от R не зависит.) Неравновесные дислокации для определенности в данном случае были распределены периодически следующим образом:  $y_i^{(+)} = b + 2(i - 1)p$ ,  $y_i^{(-)} = b + 2ip$  (i = 1, 2, ..., n/2), где p = 5b — период следования неравновесных дислокаций. При таком определении координат дислокаций их количество n задается



**Рис. 4.** Рассчитанные зависимости усредненного утолщения границы зерна в Al  $\langle \Delta l_{eq} \rangle$  от числа *n* неравновесных дислокаций. *a* — для *h* = 10*b*<sub>gb</sub>, *d* = 20 (*1*), 30 (*2*) и 40 nm (*3*); *b* — для *d* = 30 nm, *h* = 10*b*<sub>gb</sub> (*1*), 15*b*<sub>gb</sub> (*2*) и 20*b*<sub>gb</sub> (*3*).

как n = [(d - 2b)/p] (в том случае, если это число оказывается нечетным, оно уменьшается на единицу); для параметров, заданных выше, кривая на рис. 3 соответствует n = 26. Вид кривой  $\Delta W(\Delta l)$  на рис. 3, как показывает наш анализ, абсолютно типичен для любого (не только периодического) распределения неравновесных дислокаций. Всегда существует минимум изменения энергии для некоторого равновесного значения  $\Delta l_{eq} > 0$ , т. е. исходное состояние границы (рис. 2, *b*) не является стабильным. При этом переход в стабильное состояние из исходной конфигурации (рис. 2, *b*) является безбарьерным и должен осуществляться самопроизвольно, т.е. неравновесные большеугловые границы зерен имеют тенденцию к утолщению.

Далее исследована зависимость величины  $\Delta l_{eq}$  от различных параметров задачи (также на примере алюминия): числа *n* неравновесных дислокаций (рис. 4), длины *d* границы (рис. 5) и периода *h* структуры зернограничных дислокаций (рис. 6). В этом анализе рассматривались случайные распределения неравновесных дислокаций и использовалась следующая схема расчета. Для заданного набора параметров задачи генерировалось 1000 случайных распределений неравновесных дислокаций и для каждого распределения определялась величина равновесного утолщения  $\Delta l_{eq}$ . После этого  $\Delta l_{eq}$  усреднялось по всем сгенерированным распределениям и определялось среднее его значение  $\langle \Delta l_{\rm eq} \rangle$ .

Так, на рис. 4, *a* представлены зависимости  $\langle \Delta l_{eq} \rangle (n)$ , рассчитанные для значений  $h = 10b_{gb}$  и d = 20, 30 и 40 nm (кривые 1-3 соответственно). На рис. 4, b зависимости  $\langle \Delta l_{
m eq} 
angle(n)$  приведены для значений  $d=30\,{
m nm}$  и  $h = 10b_{\rm gb}$ , 15 $b_{\rm gb}$  и 20 $b_{\rm gb}$  (кривые 1-3 соответственно). Прочие параметры задачи те же, что и выше. Максимальное значение *n*, для которого построены кривые на рис. 4, соответствует среднему расстоянию между неравновесными дислокациями  $\langle p \rangle \sim 5b$ . Из рис. 4 видно, что типичные значения  $\langle \Delta l_{\mathrm{eq}} \rangle$  лежат в диапазоне от 1.5 до 5 nm, причем  $\langle \Delta l_{
m eq} \rangle$  больше для границ с меньшим числом неравновесных дислокаций, т.е. чем больше неравновесных дислокаций содержит граница зерна, тем она устойчивее к утолщению. Нужно, однако, иметь в виду, что при очень малом числе неравновесных дислокаций (например, при n = 2 имеется всего одна отрицательная неравновесная дислокация) нельзя говорить об утолщении границы как целого; скорее, происходит испускание одиночной дислокации из границы зерна. Для границ, содержащих достаточно высокую плотность неравновесных дислокаций, типичные величины  $\langle \Delta l_{eq} \rangle \sim 1.5 - 2.5 \,\mathrm{nm}$ , что хорошо коррелирует с экспериментально наблюдаемыми [12] границами приблизительно такой же толщины в массивных ультрамелкозернистых материалах.



Рис. 5. Рассчитанные зависимости усредненного утолщения границы зерна в АІ  $\langle \Delta l_{eq} \rangle$  от размера зерна *d* неравновесных дислокаций.  $a - для h = 10b_{gb}, \langle p \rangle = 5b$  (1), 10b (2) и 15b (3);  $b - для \langle p \rangle = 5b, h = 10b_{gb}$  (1),  $15b_{gb}$  (2) и  $20b_{gb}$ (3).



**Рис. 6.** Рассчитанные зависимости усредненного утолщения границы зерна в Al  $\langle \Delta l_{eq} \rangle$  от периода *h* структуры зернограничных дислокаций. a - d = 40 nm,  $\langle p \rangle = 5b$  (1), 10b (2) и 15b (3);  $b - для \langle p \rangle = 10b$ , d = 20 (1), 30 (2) и 40 nm (3).

Рис. 5 иллюстрирует зависимости  $\langle \Delta l_{eq} \rangle (d)$ . Кривые на рис. 5, *а* рассчитаны для значений  $h = 10b_{gb}$  и  $\langle p \rangle = 5b$ , 10*b* и 15*b* (кривые 1-3 соответственно), а на рис. 5, *b* — для значений  $\langle p \rangle = 5b$  и  $h = 10b_{gb}$ , 15 $b_{gb}$ и  $20b_{gb}$  (кривые 1-3 соответственно). Число неравновесных дислокаций связано со средним расстоянием  $\langle p \rangle$  между ними:  $n = [(d - 2b)/\langle p \rangle]$ . Хорошо видно, что наблюдается тенденция к увеличению  $\langle \Delta l_{eq} \rangle$  с ростом размера зерна. На кривых соответствующих низким плотностям неравновесных дислокаций (большим  $\langle p \rangle$ ) наблюдаются значительные осцилляции, связанные с дискретным характером модели и погрешностями усреднения.

На рис. 6 показаны зависимости  $\langle \Delta l_{eq} \rangle (h)$ . Кривые на рис. 6, *a* рассчитаны для значений d = 40 nm и  $\langle p \rangle = 5b$ , 10*b* и 15*b* (кривые *I*-3 соответственно), а на рис. 6, *b* — для значений  $\langle p \rangle = 10b$  и d = 20, 30 и 40 nm (кривые *I*-3 соответственно). Видно, что утолщение слабо зависит от периода структуры зернограничных дислокаций (фактически угла разориентировки границы) с небольшой тенденцией к снижению  $\langle \Delta l_{eq} \rangle$  с ростом *h*.

### 4. Заключение

Таким образом, в настоящей работе построена теоретическая модель, которая эффективно описывает искаженную деформацией большеугловую границу на основе ранее предложенной нами модели [11] для искаженных деформацией малоугловых границ и модели структурных единиц [13], описывающей обычные (неискаженные деформацией) большеугловые границы. В рамках этой модели структура границы зерна описывается в виде комбинации стандартной периодической стенки зернограничных дислокаций и случайного распределения неравновесных решеточных дислокаций противоположных знаков, захваченных из соседних зерен (рис. 2). Было показано, что расширенная конфигурация (рис. 2, c), в которой отрицательные неравновесные дислокации смещены относительно плоскости границы на некоторое расстояние  $\Delta l_{\rm eq}$ , является энергетически более выгодной, чем та, где все дислокации находятся в одной плоскости (рис. 2, b). При этом переход между этими двумя состояниями является безбарьерным и происходит самопроизвольно даже в отсутствие внешних напряжений. Были исследованы зависимости усредненных уширений  $\langle \Delta l_{eq} \rangle$  по набору случайных распределений неравновесных дислокаций в зависимости от количества неравновесных дислокаций, размера зерна (длины границы) и периода структуры зернограничных дислокаций. Было показано, что типичные значения  $\langle \Delta l_{eq} \rangle$  лежат в диапазоне ~ 1.5-2.5 nm, что хорошо коррелирует с экспериментально наблюдаемыми [12] границами приблизительно такой же ширины в массивных ультрамелкозернистых материалах.

## Список литературы

- [1] I.A. Ovid'ko. Int. Mater. Rev. 50, 65 (2005).
- [2] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma. Acta Mater. 55, 4041 (2007).
- [3] C.S. Pande, K.P. Cooper. Prog. Mater. Sci. 54, 689 (2009).
- [4] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. Structural nanocrystalline materials: fundamentals and applications. Cambridge University Press, Cambridge (2007). 364 p.
- [5] Y. Estrin, A. Vinogradov. Acta Mater. 61, 782 (2013).
- [6] Г.А. Малыгин. УФН 181, 1129 (2011).
- [7] Р.Ф. Альмухаметов, Л.А. Габдрахманова, И.З. Шарипов, Я.Ф. Абзгильдин. ФТТ 56, 224 (2014).
- [8] О.А. Маслова, Ф.В. Широков, Ю.И. Юзюк, М.Е. Marssi, M. Jain, N. Ortega, R.S. Katiyar. ФТТ 56, 308 (2014).
- [9] Н.В. Токий, В.В. Токий, А.Н. Пилипенко, Н.Е. Письменова. ФТТ 56, 966 (2014).
- [10] В.А. Москаленко, В.И. Бетехтин, Б.К. Кардашев, А.Г. Кадомцев, А.Р. Смирнов, Р.В. Смолянец, М.В. Нарыкова. ФТТ 56, 1539 (2014).
- [11] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Acta Mater. 88, 260 (2015).
- [12] X. Sauvage, G. Wilde, S.V. Divinski, Z. Horita, R.Z. Valiev. Mater. Sci. Eng. A 540, 1 (2012).
- [13] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. Interfaces in crystalline materials. Oxford Science Publ., Oxford (1996). 819 p.
- [14] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Наука, Л. (1986). 224 с.
- [15] J.P. Hirth, J. Lothe. Theory of dislocations. Wiley, N.Y. (1982). 857 p.