

Гомогенное зарождение дислокационных петель скольжения в нанокерамиках

© М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько

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

E-mail: gutkin@def.ipme.ru, ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 5 сентября 2007 г.)

Предложена теоретическая модель гомогенного зарождения дислокационных петель скольжения в деформируемых нанокристаллических керамиках при низких и высоких температурах. Зарождение дислокационной петли в кристаллическом зерне представлено как наноскопический идеальный сдвиг, величина которого (модуль вектора Бюргерса дислокации) постепенно увеличивается в процессе зарождения петли. Рассчитаны характеристики гомогенного зарождения дислокационных петель скольжения в кристаллической фазе нанокерамики на основе кубического карбида кремния. Показано, что гомогенное зарождение дислокационных петель в нанокристаллических керамиках при высоких температурах в общем случае проходит две стадии: атермическое зарождение петли „некристаллографической“ частичной дислокации и ее термоактивированное превращение в петлю обычной частичной решеточной дислокации.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (контракт 02.513.11.3190 Программы „Индустрия наносистем и материалов“ и грант НШ-4518.2006.1 поддержки ведущих научных школ), Фонда поддержки отечественной науки, Программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций“, Фонда CRDF (грант N RUE2-2684-ST-05) и Санкт-Петербургского научного центра РАН.

PACS: 61.72.Lk, 62.20.Fe, 62.25.+g, 81.05.Je, 81.07.Bc

1. Введение

Экспериментальные и теоретические исследования механических свойств нанокристаллических материалов (НКМ) составляют одно из приоритетных направлений в физике твердого тела (см., например, [1–6]). Особый интерес представляет физическая природа сверхвысоких показателей прочности и микротвердости, а также других необычных механических характеристик нанокристаллических металлов и керамик. Так, нанокристаллические керамики обладают сверхтвердостью и сверхпрочностью [7,8], и в то же время при высоких температурах демонстрируют сверхпластичность [9,10], которая чрезвычайно важна для их технологического использования. Основными физическими механизмами (сверх)пластической деформации в нанокерамиках являются скольжение решеточных дислокаций и межзеренное скольжение [8–10]. Однако особенности действия этих механизмов в нанокерамиках, где велика роль наномасштабных эффектов, межзеренных и межфазных границ, в настоящее время не ясны. В частности, вопрос о происхождении и роли решеточных дислокаций в НКМ с ультрамелким зерном (размером порядка или менее 30 nm) относится сегодня к числу наиболее дискуссионных [8,11–13]. Считается экспериментально установленным, что обычные источники, типа источника Франка–Рида, в таких мелких зернах не работают, и им на смену приходят источники на границах зерен. Действительно, как показывают экспериментальные наблюдения [13–19], результаты компьютерного моделирования [12,20–23] и теоретические расчеты [13,24–29], гра-

ницы зерен испускают частичные и полные решеточные дислокации в процессе пластической деформации таких НКМ. При этом дислокации зарождаются гетерогенно на различных зернограницных дефектах. В частности, предложены теоретические модели зарождения решеточных дислокаций на зернограницных дислокациях [25–29] и дисклинациях [24].

Возникает вопрос: возможно ли при каких-то особых условиях гомогенное зарождение дислокаций в объеме ультрамелкого нанозерна? В недавней работе [30] был предложен механизм такого зарождения дислокаций. Этот механизм состоит в нелокальном гомогенном зарождении наноскопической петли „некристаллографической“ частичной дислокации с вектором Бюргерса s , величина которого s непрерывно увеличивается в процессе формирования петли. Сделанный в [30] приближенный континуальный расчет изменения энергии, связанного с гомогенным зарождением такой петли в нанокристаллическом никеле, показал, что если размер зарождающейся петли и действующее на нее сдвиговое напряжение достаточно велики, то образование петли не требует преодоления энергетического барьера. Например, для безбарьерного образования квадратной петли скольжения размером 20 nm оказалось достаточным сдвиговое напряжение в плоскости петли порядка 3 GPa. При этом чем больше размер образующейся петли, тем меньшее напряжение необходимо для ее безбарьерного зарождения.

Основная цель настоящей работы — дальнейшее развитие модели [30] с приложением к пластичности нанокерамик на примере кубического карбида кремния

с малым размером зерна (порядка 30 нм). Показано, что процесс гомогенного зарождения дислокационной петли в такой нанокерамике сильно зависит от величины приложенного напряжения. В частности, при относительно невысоком напряжении (порядка 3 ГПа) этот процесс может состоять из двух стадий: 1) атермического зарождения петли „некристаллографической“ частичной дислокации; 2) ее термоактивированного превращения в петлю обычной частичной решеточной дислокации.

2. Модель гомогенного зарождения дислокационной петли скольжения в нанозерне

Основная идея модели [30] иллюстрируется рис. 1, где схематично показаны стандартный (рис. 1, *a-d*) и новый [30] (рис. 1, *e-h*) механизмы гомогенного зарождения скользящей петли решеточной дислокации в нанозерне размером d . По стандартному механизму гомогенное зарождение решеточной дислокации в идеальном кристалле осуществляется путем локального сдвига решетки на вектор Бюргерса частичной или полной дислокации в пределах малой петли, которая затем расширяется под действием приложенного напряжения τ . Схематично образование петли полной дислокации с постоянным вектором Бюргерса \mathbf{B} показано на рис. 1, *a-d*. Хорошо известно, что гомогенное зарождение дислокации по этому механизму требует преодоления высокого энергетического барьера [31,32] и поэтому считается практически невозможным в реальных кристаллах. Альтернативный механизм [30] был предложен для НКМ, которые пластически деформируются при очень высоких упругих напряжениях. Этот механизм предполагает нелокальное гомогенное зарождение петли „некристаллографической“ частичной дислокации, вектор Бюргерса которой s растет от нуля до вектора Бюргерса частичной решеточной дислокации \mathbf{b} , а затем и до вектора Бюргерса полной решеточной дислокации $\mathbf{B} \approx 2\mathbf{b}$. Другими словами, происходит постепенно возрастающий сдвиг кристаллической решетки в пределах петли конечного размера L . В рамках модели [30] размер петли L считался постоянным, хотя, конечно, он может увеличиваться в процессе формирования петли (рис. 1, *e-h*). В процессе увеличения сдвига s внутри петли развивается обобщенный дефект упаковки, удельная энергия которого γ обычно описывается „двугорбой“ зависимостью от s [33–37]. Минимум на этой зависимости достигается в точке $s = b$ и соответствует удельной энергии обычного равновесного дефекта упаковки, а точки максимума отвечают удельной энергии неравновесного дефекта упаковки. Заметим, что в модели [30] использовалась сильно упрощенная „одноголовая“ зависимость $\gamma(s)$.

2.1. Зарождение первичной петли. Отталкиваясь от общей идеи [30], проведем корректный и деталь-

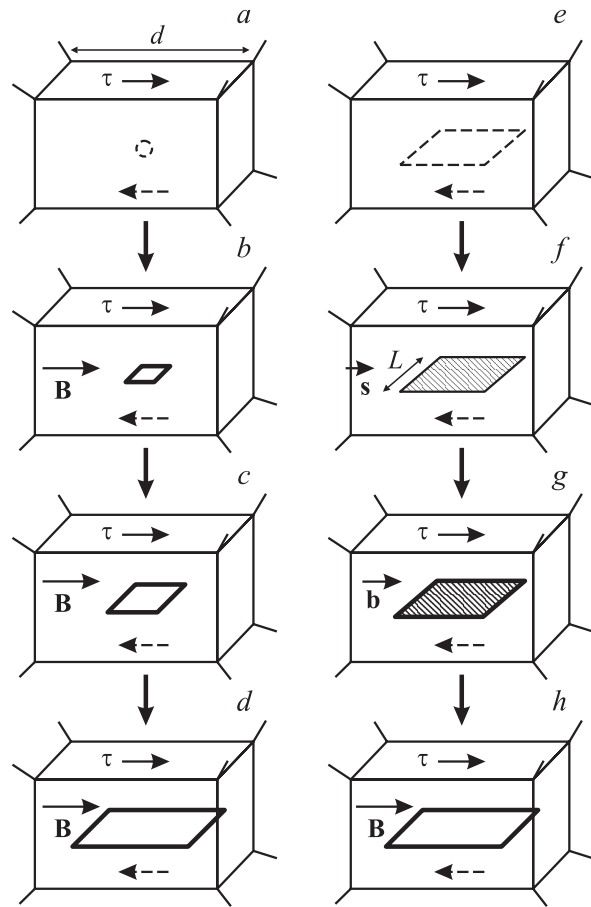


Рис. 1. Модели гомогенного зарождения дислокационной петли скольжения в нанозерне размером d под действием приложенного сдвигового напряжения τ . *a-d* — стандартный механизм зарождения, когда в некоторой локальной области образуется и увеличивается в размерах петля полной решеточной дислокации с постоянным вектором Бюргерса \mathbf{B} ; *e-h* — новый механизм зарождения [30], когда в некоторой изначально нелокальной области конечного размера L образуется петля „некристаллографической“ частичной дислокации с малым вектором Бюргерса s ($0 < s \leq B$). Когда s достигает величины b , эта петля превращается в петлю частичной решеточной дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} (*g*); при последующем увеличении s до величины B — в петлю полной решеточной дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{B} \approx 2\mathbf{b}$ (*h*).

ный анализ гомогенного зарождения дислокационной петли скольжения. Пусть в бесконечной упругоизотропной среде под действием постоянного сдвигового напряжения τ образуется прямоугольная дислокационная петля скольжения с размерами $d \times 2a$ и вектором Бюргерса \mathbf{s} произвольной величины s , $0 < s \leq B$ (рис. 2, *a*). В дальнейшем для краткости будем называть величину s мощностью петли. Поскольку далее при анализе эволюции этой петли нам потребуется исследовать зарождение на одном из ее отрезков новой дислокационной петли (рис. 2, *b*), данную исходную петлю будем называть первичной, а следующую — вторичной.

Появление первичной петли приводит к изменению полной энергии системы ΔW_1 , которое в рамках модели упругого континуума можно записать в виде

$$\Delta W_1 = W_{el,1} + W_{c,1} + W_{\gamma,1} - A_1, \quad (1)$$

где $W_{el,1}$ — упругая энергия первичной дислокационной петли, $W_{c,1}$ — энергия дислокационного ядра, $W_{\gamma,1}$ — энергия обобщенного дефекта упаковки, ограниченного линией первичной петли, A_1 — работа по зарождению первичной петли под действием сдвигового напряжения τ .

Упругая энергия $W_{el,1}$ прямоугольной дислокационной петли скольжения с размерами $d \times 2a$ и вектором Бюргера s , направленным вдоль отрезков длиной d , определяется выражением [38]

$$W_{el,1} = Ds^2 \left\{ (2 - \nu)(r - d - 2a) + 2a \ln \frac{4ad}{(r + 2a)r_{c1}} + (1 - \nu)d \ln \frac{4ad}{(r + d)r_{c1}} \right\}, \quad (2)$$

где $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, $r^2 = d^2 + 4a^2$ и $r_{c1} \approx s$ — радиус обрезания упругого поля петли на ее линии.

Энергию ядра дислокационной петли можно аппроксимировать, используя обычные оценки для погонных энергий винтовых и краевых дислокаций [31]

$$W_{c,1} \approx \frac{Ds^2}{2} (1 - \nu)2d + \frac{Ds^2}{2} 4a = Ds^2[(1 - \nu)d + 2a]. \quad (3)$$

Здесь первое слагаемое в правой части приближенного равенства описывает энергию ядра винтовых отрезков петли, второе — энергию ядра ее краевых отрезков.

Энергию дефекта упаковки $W_{\gamma,1}$ аппроксимируем выражением

$$W_{\gamma,1} = 2\gamma(s)(d - 2s)(a - s), \quad (4)$$

где $\gamma(s)$ — удельная энергия дефекта упаковки. Основываясь на результатах компьютерного моделирования [33–37], полагаем, что зависимость $\gamma(s)$ описывается „двугорбым“ потенциалом

$$\gamma(s) = \begin{cases} \gamma_m \sin \frac{2\pi s}{B}, & s < \frac{B}{4}, \\ \frac{\gamma_m + \gamma_0}{2} - \frac{\gamma_m - \gamma_0}{2} \cos \frac{4\pi s}{B}, & \frac{B}{4} \leq s < \frac{3B}{4}, \\ -\gamma_m \sin \frac{2\pi s}{B}, & \frac{3B}{4} \leq s \leq B, \end{cases} \quad (5)$$

где γ_0 — удельная энергия обычного равновесного дефекта упаковки, образующегося внутри петли обычной частичной решеточной дислокации при $s = b \approx B/2$, а γ_m — максимальная удельная энергия неравновесного дефекта упаковки, формирующегося внутри петли частичной дислокации при $s \neq b$.

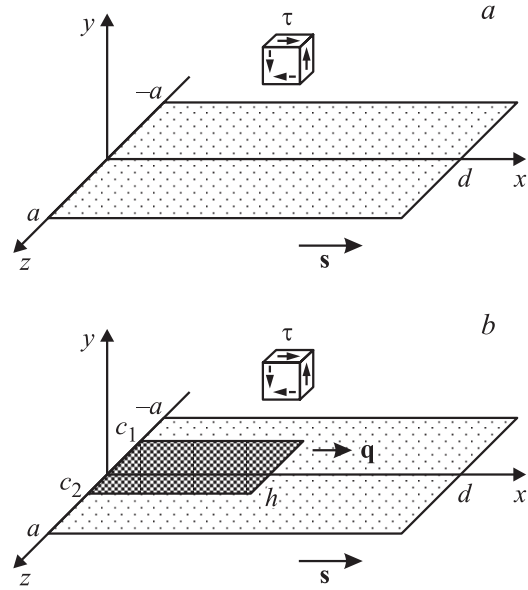


Рис. 2. Образование первичной (а) и вторичной (б) дислокационных петель скольжения под действием приложенного сдвигового напряжения τ . Вторичная петля с вектором Бюргера q и размером $h \times c$ ($c = c_2 - c_1$) зарождается на краевом отрезке первичной дислокационной петли скольжения с вектором Бюргера s и размером $d \times 2a$.

Работа A_1 , которую производит внешнее напряжение τ при пластическом сдвиге по площади первичной петли, рассчитывается как обычно:

$$A_1 = 2s\tau ad. \quad (6)$$

Таким образом, изменение полной энергии системы ΔW_1 при зарождении первичной петли определяется выражениями (1)–(6).

В частном случае квадратной петли ($2a = d$) выражение для ΔW_1 записывается в простом виде функции двух безразмерных переменных $\eta = s/b$ и $\xi = d/b$

$$\Delta W_1 = Db^3 \left\{ \eta^2 \xi (2 - \nu) \left(\ln \frac{\xi}{\eta} + 0.22 \right) + (\xi - 2\eta)^2 \frac{\gamma(\eta)}{Db} - \eta \xi^2 \frac{\tau}{D} \right\}. \quad (7)$$

С помощью (7) рассмотрим, как действует предложенный механизм зарождения первичной петли в типичной модельной нанокерамике с ГЦК-решеткой — в кубическом карбиде кремния (3C-SiC). Примем, что средний размер зерна порядка $200b \approx 30$ nm. Остальные параметры принимают следующие значения [39–41]: $G = 217$ GPa, $\nu = 0.23$, $b = 0.154$ nm и $\gamma_0 \approx 0.1$ mJ/m². Поскольку нам не удалось найти в литературе ни измеренных, ни рассчитанных значений для величины γ_m , мы принимали, что она может составлять от $2\gamma_0$ до $25\gamma_0$. Расчеты показали, что из-за чрезвычайной малости величины γ_0 все эти значения приводят практически к

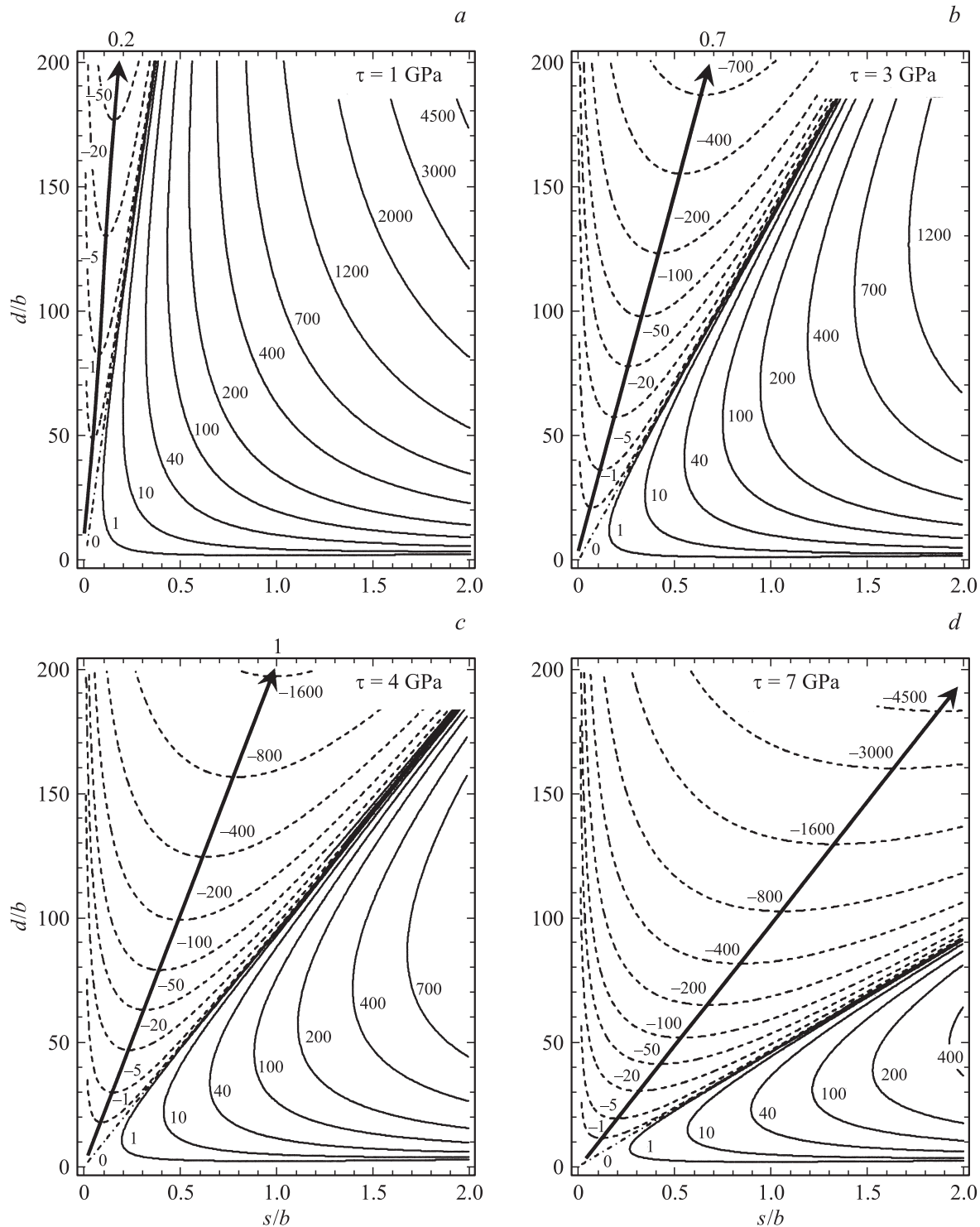


Рис. 3. Карты изменения полной энергии системы $\Delta W_1(s, d)$ при зарождении первичной квадратной петли частичной дислокации в кубическом SiC под действием приложенного сдвигового напряжения $\tau = 1$ (a), 3 (b), 4 (c) и 7 ГПа (d). Значения ΔW_1 указаны в eV. Жирные стрелки приблизительно показывают безбарьерное увеличение размера и мощности дислокационной петли.

одинаковым результатам. Для определенности возьмем $\gamma_m = 20\gamma_0$, что характерно для ковалентных кристаллов, например кремния [33].

Приложим к такой модельной нанокерамике постоянное сдвиговое напряжение τ . Предположим, что в

нанозернах, ориентированных таким образом, чтобы плоскость легкого скольжения (111) совпадала с плоскостью действия τ , гомогенно зарождаются первичные петли частичных дислокаций. На рис. 3 приведены карты соответствующего изменения полной энергии системы

$\Delta W_1(\eta, \xi)$, на которые также нанесены наиболее вероятные траектории развития первичной петли (жирные стрелки). Можно отметить следующие основные особенности этих карт. Прямые изолинии $\Delta W_1(\eta, \xi) = 0$ делят их на две клиновидные области: области отрицательных и положительных значений. В первой области, при $\Delta W_1(\eta, \xi) < 0$, возможны зарождение и развитие первичной петли, во второй области, при $\Delta W_1(\eta, \xi) > 0$, зарождение петли невозможно. Чем выше уровень приложенного напряжения τ , тем шире первая область и уже вторая. Пока напряжение τ относительно мало (рис. 3, *a*), первая область очень узка, и зародившаяся петля может только увеличиваться в размере, незначительно повышая свою мощность. При больших τ (рис. 3, *b-d*) первая область становится существенно шире, и распространение петли сопровождается ростом ее мощности. Таким образом, гомогенное зарождение первичной петли в 3C-SiC происходит безбарьерно, однако достижимая мощность петли s зависит от приложенного напряжения τ . Например, при $\tau = 1$ GPa (рис. 3, *a*) мощность петли может вырасти только до $\approx 0.2b$, а при $\tau = 3$ GPa (рис. 3, *b*) — до $\approx 0.7b$. При $\tau = 4$ GPa (рис. 3, *c*) она достигает уже мощности обычной частичной решеточной дислокации b , а при $\tau = 0.7$ GPa (рис. 3, *d*) — мощности полной решеточной дислокации $B \approx 2b$.

Можно заключить, что гомогенное зарождение первичной дислокационной петли в нанокерамике с очень низкими значениями параметров энергии обобщенного дефекта упаковки (γ_0 и γ_m) возможно при относительно невысоких (≤ 7 GPa для 3C-SiC) приложенных сдвиговых напряжениях и не требует термической активации. Такой уровень упругих напряжений достигим, например, при индентировании или ударном нагружении.

2.2. Зарождение вторичной петли. Предположим теперь, что на первой стадии гомогенного зарождения дислокационной петли образовалась первичная прямоугольная петля скольжения мощностью s и размером $d \times 2a$ (рис. 2, *a*). Как следует из рис. 3, размеры первичной петли могут быть ограничены только размерами зерна. Рассмотрим дальнейшую эволюцию такой петли под действием приложенного сдвигового напряжения τ . Поскольку расширению первичной петли препятствуют границы зерна, ее развитие возможно только за счет увеличения ее мощности. Представляется, что наиболее вероятным механизмом такого увеличения может служить зарождение новой (вторичной) петли скольжения на одном из отрезков первичной петли (рис. 2, *b*). Расширяясь под действием внешнего напряжения τ , эта вторичная петля производит дополнительный пластический сдвиг на заметаемой ею площади. Обозначив вектор Бюргера вторичной петли как \mathbf{q} , получаем, что расширение вторичной петли до размеров первичной приводит к образованию новой петли с суммарным вектором Бюргера ($\mathbf{s} + \mathbf{q}$). При определенных условиях этот механизм может срабатывать неоднократно, приводя к формированию петли частичной или

полной решеточной дислокации и обеспечивая постепенную пластическую релаксацию в пределах одного нанозерна в том случае, если в нем не действуют обычные источники дислокаций.

Рассмотрим, при каких условиях может действовать предложенный механизм зарождения вторичной петли. Очевидно, что ее образованию будут препятствовать такие факторы, как упругая энергия самой вторичной петли $W_{el,2}$, энергия ее ядра $W_{c,2}$ и энергия ее упругого взаимодействия с первичной петлей W_{int} . Стимулирующим фактором служит работа A_2 , которую производит внешнее напряжение τ при пластическом сдвиге по площади вторичной петли. Неоднозначным является изменение энергии дефекта упаковки $\Delta W_{\gamma,2}$ на площади вторичной петли, так как его знак зависит от мощности первичной и вторичной петель. Поскольку в общем случае зависимость энергии дефекта упаковки от сдвига решетки описывается „двугорбым“ потенциалом, минимум которого приходится на величину вектора Бюргера частичной решеточной дислокации b , возможны следующие варианты. Если мощности первичной и вторичной петель намного меньше величины вектора Бюргера b частичной решеточной дислокации ($s + q \ll b$), то $\Delta W_{\gamma,2} > 0$. Если $(s, s + q) \rightarrow B \approx 2b$, то $\Delta W_{\gamma,2} < 0$. В промежуточных ситуациях изменение энергии $\Delta W_{\gamma,2}$ может быть положительным или отрицательным.

Таким образом, зарождение вторичной петли приводит к изменению полной энергии системы ΔW_2 , которое можно записать в виде

$$\Delta W_2 = W_{el,2} + W_{int} + W_{c,2} + \Delta W_{\gamma,2} - A_2. \quad (8)$$

Собственная упругая энергия $W_{el,2}$ прямоугольной дислокационной петли скольжения с размерами $h \times c$ и вектором Бюргера \mathbf{q} , направленным вдоль отрезков длиной h , определяется выражением [38]

$$W_{el,2} = Dq^2 \left\{ (2 - \nu)(g - h - c) + c \ln \frac{2ch}{(g + c)r_{c2}} + (1 - \nu)h \ln \frac{2ch}{(g + h)r_{c2}} \right\}, \quad (9)$$

где $g^2 = h^2 + c^2$ и $r_{c2} \approx q$ — радиус обрезания упругого поля вторичной петли на ее линии.

Энергия упругого взаимодействия между первичной и вторичной петлями W_{int} зависит от их размеров и взаимного расположения. В геометрии, показанной на рис. 2, *b*, ее можно рассчитать как работу по зарождению вторичной петли в поле упругих напряжений первичной петли [42] по формуле

$$W_{int} = -q \int_{r_{c3}}^h dx \int_{c_1}^{c_2} dz \sigma_{xy}(x, y = 0, z), \quad (10)$$

где $r_{c3} \approx s + q$ — наименьшее допустимое (при расчетах в рамках классической линейной теории упругости) расстояние между краевыми отрезками первичной

и вторичной петлей, $z = c_1$ и $z = c_2$ — координаты винтовых отрезков вторичной петли. Стоящая под интегралом компонента σ_{xy} поля напряжений первичной петли имеет вид [43]

$$\sigma_{xy}(x, y, z) = \frac{Dsut}{2\rho(t^2 + y^2)} \left(-1 + \frac{y^2}{\rho^2} + \frac{2y^2}{t^2 + y^2} - (1 - \nu) \frac{t^2 + y^2}{u^2 + y^2} \right) \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{x'=0}^{x'=d}, \quad (11)$$

где $u = z - z'$, $t = x - x'$ и $\rho^2 = u^2 + t^2 + y^2$. Подставляя ее в формулу (10) и выполняя интегрирование, получаем

$$W_{\text{int}} = \frac{Dsq}{2} \left\{ (2 - \nu) \sqrt{t^2 + u^2} - (1 - \nu) t \ln \left(t + \sqrt{t^2 + u^2} \right) - |u| \ln \frac{|u| + \sqrt{t^2 + u^2}}{|t|} \right\} \Bigg|_{z'=-a}^{z'=a} \Bigg|_{z=c_1}^{z=c_2} \Bigg|_{x'=0}^{x'=d} \Bigg|_{x=r_{c3}}^{x=h}. \quad (12)$$

Изменяя теперь координаты винтовых отрезков вторичной петли c_1 и c_2 (но сохраняя при этом постоянной их разность $c = c_2 - c_1$ — размер петли вдоль оси z), можно выбрать такое место зарождения вторичной петли на оси z , которое дает наименьшую энергию взаимодействия W_{int} . Например, сравним две предельные ситуации, когда вторичная петля зарождается в углу первичной квадратной петли размера d или в середине ее краевого отрезка. На рис. 4 показаны карты изолиний энергии взаимодействия W_{int} в пространстве относительных размеров вторичной петли h/d и c/d , построенные для этих двух ситуаций. Сравнивая рис. 4, *a* и *b*, видим, что в первом случае изолинии, соответствующие одинаковым уровням $W_{\text{int}}/(Dsqd/2) = 0.5, 2, 4$ и т.д., проходят заметно ниже (ближе к левому нижнему углу карты), чем во втором. Это означает, что зарождение вторичной петли из угла первичной (рис. 4, *a*) приводит к более быстрому росту энергии взаимодействия W_{int} , а значит, и к большей силе противодействия зарождению вторичной петли со стороны первичной. Следовательно, более вероятным будет зарождение вторичной петли в середине краевого отрезка первичной петли (рис. 4, *b*).

С учетом этого заключения энергию ядра вторичной петли можно аппроксимировать по аналогии с (3) как

$$W_{c,2} \approx \frac{Dq^2}{2} (1 - \nu) 2h + \frac{Dq^2}{2} c + \left(\frac{D(s + q)^2}{2} - \frac{Ds^2}{2} \right) c = Dq^2 \left\{ (1 - \nu) h + \left(1 + \frac{s}{q} \right) c \right\}. \quad (13)$$

Здесь первое слагаемое в правой части приближенного равенства описывает энергию ядра винтовых отрезков вторичной петли, второе — энергию ядра ее „переднего“ (подвижного) краевого отрезка, а третье — изменение

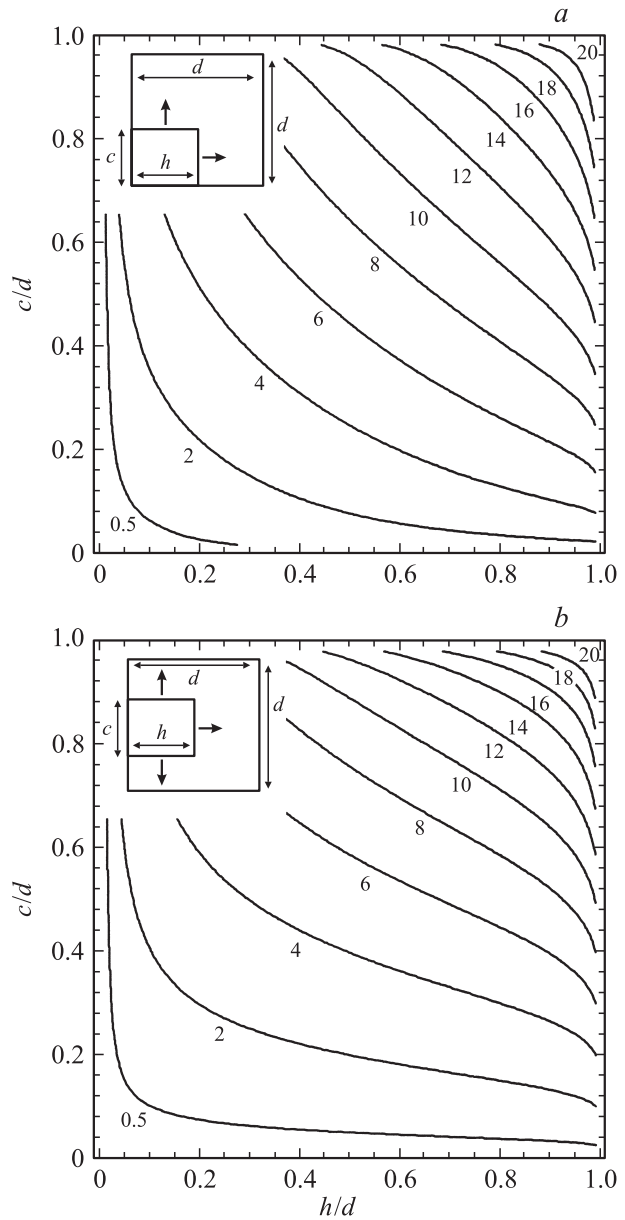


Рис. 4. Карты энергии упругого взаимодействия между двумя дислокационными петлями скольжения, показанными на вставках. Вторичная петля зарождается в углу первичной квадратной петли (а) или в середине ее краевого отрезка (b). Значения энергии даны в единицах $Dsqd/2$.

энергии ядра на том участке первичной петли, на который накладывается „задний“ (неподвижный) краевой отрезок вторичной петли.

Изменение энергии дефекта упаковки $\Delta W_{\gamma,2}$ аппроксимируем выражением

$$\Delta W_{\gamma,2} = \Delta\gamma(q)(h - 2q)(c - 2q), \quad (14)$$

где $\Delta\gamma(q)$ — изменение удельной энергии дефекта упаковки на площади, заматаемой вторичной петлей: $\Delta\gamma(q) = \gamma(s + q) - \gamma(s)$. Предполагается, что зависимость удельной энергии дефекта упаковки от величины

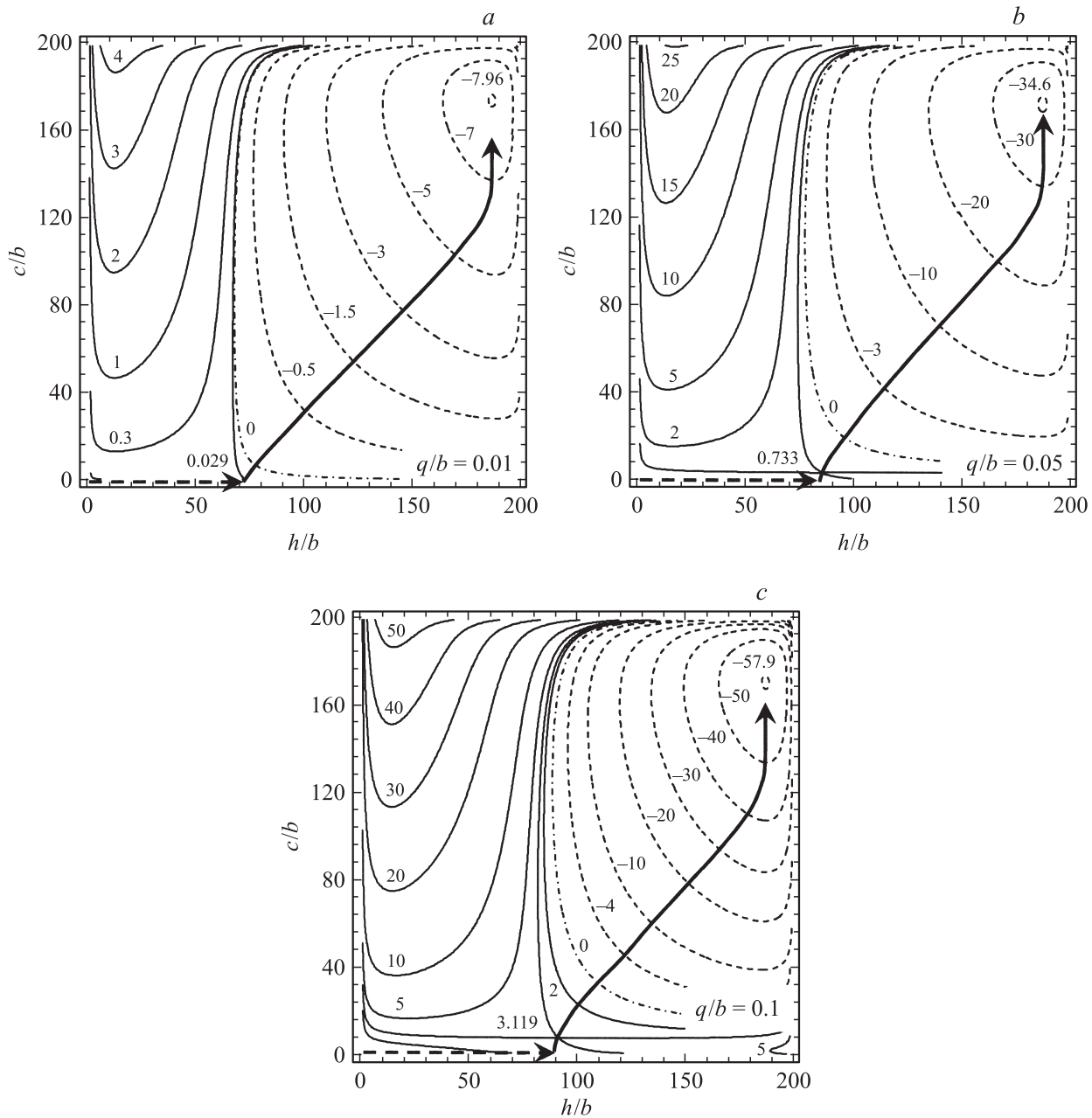


Рис. 5. Карты изменения полной энергии системы $\Delta W_2(h, c)$ при зарождении вторичной прямоугольной петли с размером $h \times c$ и мощностью $q = 0.01b$ (a), $0.05b$ (b) и $0.1b$ (c) внутри первичной квадратной петли с размером $d = 200b$ и мощностью $s = 0.7b$ в кубическом SiC под действием приложенного сдвигового напряжения $\tau = 3$ ГПа. Значения ΔW_2 указаны в eV. Жирные стрелки показывают траекторию расширения вторичной петли.

$p(= s, s + q)$ вектора Бюргера петли описывается „двугорбым“ потенциалом (5) с заменой s на p .

Наконец, работа A_2 , которую производит внешнее напряжение τ при пластическом сдвиге по площади вторичной петли, определяется формулой

$$A_2 = q\tau ch. \quad (15)$$

Таким образом, изменение полной энергии системы ΔW_2 при зарождении вторичной петли описывается выражениями (8), (9), (12)–(15).

Рассмотрим зарождение вторичной петли в модельной нанокерамике 3C-SiC с теми же значениями параметров, которые использовались выше при анализе гомогенного зарождения первичной петли. Как и в случае первичной петли, зарождение вторичной петли требует определенного уровня приложенного напряжения τ . Например, при $\tau = 1$ ГПа увеличить дальше мощность первичной петли ($s \approx 0.2b$) за счет зарождения и развития вторичной оказывается невозможно, поскольку это ведет к увеличению полной энергии системы. Подняв напряже-

ние до 3 ГПа (рис. 3, *b*), получаем мощность первичной петли $s \approx 0.7b$, которую можно увеличить путем зарождения вторичной петли. Покажем это с помощью карт изменения энергии ΔW_2 (рис. 5), построенных в пространстве размеров вторичной петли по формулам (8), (9), (12)–(15) при фиксированных значениях мощности первичной ($s \approx 0.7b$) и вторичной ($q = 0.01b, 0.05b, 0.1b$) петель. Карты $\Delta W_2(h, c)$ делятся на две области изолинией $\Delta W_2(h, c) = 0$: слева, в области относительно малых h , $\Delta W_2(h, c) > 0$; справа, в области относительно больших h , $\Delta W_2(h, c) < 0$. Таким образом, левая область показывает пространственную конфигурацию энергетического барьера, который должна преодолеть вторичная петля для своего зарождения. Правая область — это зона неустойчивого расширения вторичной петли в пределах первичной (в пределах нанозерна). Из рис. 5 видно, что при достаточно большой мощности вторичной петли (по крайней мере при $q \geq 0.01b$) на энергетическом барьере имеется единственная седловая точка, преодолев которую вторичная петля начинает неустойчиво расширяться. При $q = 0.01b$ (рис. 5, *a*) ее координаты ($h \approx 72b, c \approx 2b$), при $q = 0.05b$ (рис. 5, *b*) — ($h \approx 85b, c \approx 4b$), а при $q = 0.1b$ (рис. 5, *c*) — ($h \approx 91b, c \approx 8b$). Величина барьера в этой точке соответственно равна 0.029, 0.733 и 3.119 eV.

Первая из этих величин настолько мала, что такой барьер легко преодолить даже при комнатной температуре, хотя увеличение мощности первичной петли при этом оказывается весьма незначительным (порядка 1.4%). Действительно, при комнатной температуре ($T = 300$ К) средняя тепловая энергия, приходящаяся на один атом кристалла, составляет величину порядка $kT \approx 0.026$ eV, где k — постоянная Больцмана. Число атомов, вовлеченных в образование вторичной петли, можно в нулевом приближении оценить как удвоенное число атомов, приходящихся на площадь петли. Для петли размером $72b \times 2b$ получаем приблизительно 80 атомов. Распределяя высоту барьера (0.029 eV) равномерно между 80 атомами, получаем приблизительно $\Delta W_{2,\max} \approx 3.6 \cdot 10^{-4}$ eV на атом. Вероятности соответствующих термофлуктуаций при $T = 300$ К составляют ≈ 0.986 для одного атома и ≈ 0.327 для 80 атомов.

Вторая величина (0.733 eV) уже требует значительно более высокой температуры для преодоления такого барьера, однако и увеличение мощности первичной петли в этом случае становится гораздо более существенным (около 7%). Проводя оценочный расчет, аналогичный предыдущему, получаем приблизительно 180 атомов, на каждый из которых приходится $\Delta W_{2,\max} \approx 4.07 \cdot 10^{-3}$ eV. Взяв $T = 2300$ К, получаем вероятности соответствующих термофлуктуаций ≈ 0.980 для одного атома и ≈ 0.0246 для 180 атомов.

Третья величина (3.119 eV) оказывается настолько высокой, что такой барьер можно считать совершенно непреодолимым.

В случае преодоления седловой точки дальнейшее неустойчивое расширение вторичной петли происходит

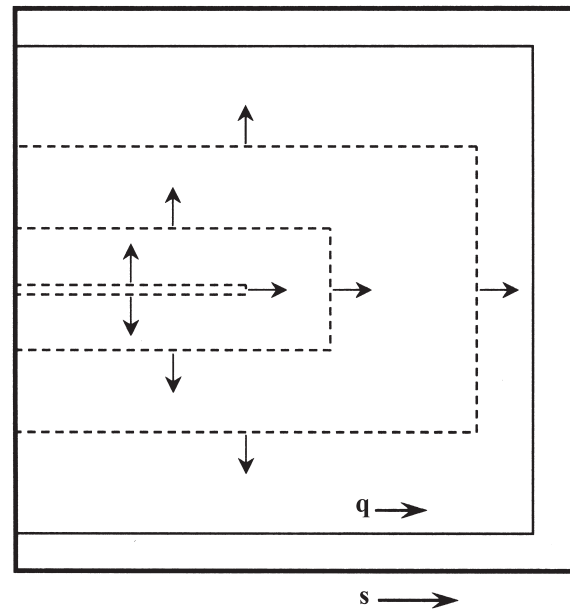


Рис. 6. Схематическое изображение последовательных стадий зарождения и неустойчивого расширения (штриховые линии) прямоугольной вторичной дислокационной петли скольжения внутри квадратной первичной дислокационной петли скольжения (жирная сплошная линия). Тонкой сплошной линией показана равновесная конфигурация вторичной петли.

по траекториям, схематично изображенным на рис. 5 (штриховыми стрелками показаны участки, которые не описываются в рамках принятой здесь линейной теории упругости). На рис. 6 изображена схема последовательного неустойчивого расширения вторичной петли мощностью $q = 0.05b$ внутри квадратной первичной петли мощностью $s \approx 0.7b$ и размером $200b \approx 31$ nm под действием приложенного сдвигового напряжения $\tau = 3$ ГПа. На начальной стадии зарождения (в области седловой точки на рис. 5, *b*) вторичная петля сильно вытянута вдоль своих винтовых отрезков, а затем она постепенно расширяется, приближаясь по форме к квадрату. Естественно, что полного слияния первичной и вторичной петли в нашей модели не получить, поскольку приложенное напряжение фиксировано, а сила отталкивания между сближающимися отрезками петель стремится к бесконечности в рамках классической линейной теории упругости. Равновесное расстояние между этими отрезками получается порядка $12b \approx 1.85$ nm, т.е. порядка толщины межзеренных границ в нанокерамике.

Таким образом, механизм зарождения вторичной петли для увеличения мощности первичной представляется вполне реальным при относительно небольших приложенных напряжениях и высоких температурах нагружения нанокерамики на основе кубического карбида кремния. При этом мощность первичной петли может увеличиваться на несколько процентов за каждый акт зарождения новой вторичной петли.

3. Заключение

Предложена теоретическая модель, описывающая гомогенное зарождение дислокационных петель скольжения в нанокерамиках с малым размером зерна (порядка 30 nm). Модель служит развитием предшествующей работы авторов [30], в которой был рассмотрен механизм нелокального гомогенного зарождения „некристаллографических“ частичных дислокаций с увеличивающимся вектором Бюргерса. В настоящей работе на примере кубического карбида кремния показано, что процесс зарождения и развития таких петель сильно зависит от величины приложенного сдвигового напряжения. При относительно малом напряжении порядка 1 GPa в нанозерне может гомогенно зародиться петля „некристаллографической“ частичной дислокации с вектором Бюргерса, меньшим вектора Бюргерса обычной частичной решеточной дислокации. Зарождение такой петли не требует преодоления энергетического барьера и соответственно не требует термической активации. При более высоком напряжении (порядка 3 GPa) зарождение дислокационной петли в таком нанозерне может включать две стадии: 1) стадию атермического зарождения петли „некристаллографической“ частичной дислокации; 2) стадию ее термоактивированного превращения в петлю обычной частичной решеточной дислокации. При еще более высоких напряжениях (от 4 до 7 GPa) в нанозерне такого размера могут атермически и гомогенно зарождаться соответственно обычные частичные и полные решеточные дислокации.

Список литературы

- [1] О.В. Клявин, В.И. Николаев, Л.В. Хабарин, Ю.М. Чернов, В.В. Шпейзман. ФТТ **45**, 2187 (2003).
- [2] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. ФТТ **46**, 1986 (2004).
- [3] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев. ФТТ **47**, 816 (2005).
- [4] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. ФТТ **47**, 793 (2005).
- [5] 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).
- [6] Г.А. Малыгин. ФТТ **49**, 961 (2007).
- [7] S. Veprek, A.S. Argon. J. Vac. Sci. Technol. **20**, 650 (2002).
- [8] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural nanocrystalline materials: fundamentals and applications*. Cambridge University Press, Cambridge (2007).
- [9] X. Zhou, D.M. Hulbert, J.D. Kunz, R.K. Sadangi, V. Shukla, B. Kear, A.K. Mukherjee. Mater. Sci. Eng. A **394**, 353 (2005).
- [10] X. Xu, T. Nishimura, N. Hirotsaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka. Acta Mater. **54**, 255 (2006).
- [11] J. Weissmueller, J. Markmann. Adv. Eng. Mater. **7**, 202 (2005).
- [12] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter. Acta Mater. **53**, 1 (2005).
- [13] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma. Acta Mater. **55**, 4041 (2007).
- [14] A.K. Mukherjee. Mater. Sci. Eng. A **322**, 1 (2002).

- [15] M.W. Chen, E. Ma, K.J. Hemker, H.W. Sheng, Y.M. Wang, X.M. Cheng. Science **300**, 1275 (2003).
- [16] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Norton, P. Wang. Acta Mater. **51**, 387 (2003).
- [17] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu. Appl. Phys. Lett. **83**, 5062 (2003).
- [18] X. Wu, E. Ma, Y.T. Zhu. J. Mater. Sci. **42**, 1427 (2007).
- [19] X.L. Wu, Y. Qi, Y.T. Zhu. Appl. Phys. Lett. **90**, 221 911 (2007).
- [20] T. Shimokawa, A. Nakatani, H. Kitagawa. Phys. Rev. B **71**, 224 110 (2005).
- [21] G.P. Zheng, Y.M. Wang, M. Li. Acta Mater. **53**, 3893 (2005).
- [22] A.J. Cao, Y.G. Wei. Appl. Phys. Lett. **89**, 041 919 (2006).
- [23] G.P. Zheng. Acta Mater. **55**, 149 (2007).
- [24] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. ФТТ **46**, 1975 (2004).
- [25] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Acta Mater. **52**, 3793 (2004).
- [26] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. ФТТ **47**, 1602 (2005).
- [27] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. ФТТ **48**, 1410 (2006).
- [28] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Phys. Rev. B **73**, 064 102 (2006).
- [29] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Phil. Mag. **86**, 1483 (2006).
- [30] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Appl. Phys. Lett. **88**, 211 901 (2006).
- [31] Дж. Хирт, Й. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [32] G. Xu, A.S. Argon. Phil. Mag. Lett. **80**, 605 (2000).
- [33] B. Joos, Q. Ren, M.S. Duesbery. Phys. Rev. B **50**, 5890 (1994).
- [34] G. Lu, N. Cioussis, V.V. Bulatov, N. Kaxiras. Phys. Rev. B **62**, 3099 (2000).
- [35] N. Bernstein, E.B. Tadmor. Phys. Rev. B **69**, 094 116 (2004).
- [36] H. van Swygenhoven, P.M. Derlet, A.G. Frøseth. Nat. Mater. **3**, 399 (2004).
- [37] P. Lazar, D.C. Podlousky. Phys. Rev. B **75**, 024 112 (2007).
- [38] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman. Phys. Stat. Sol. (b) **241**, 1810 (2004).
- [39] W.R.L. Lambrecht, B. Segall, M. Methfessel, M. van Schilf-gaarde. Phys. Rev. B **44**, 3685 (1991).
- [40] J. Kräußlich, A. Bauer, B. Köcher, K. Goetz. Mater. Sci. Forum **353–356**, 319 (2001).
- [41] U. Kaiser, I.I. Khodos. Phil. Mag. A **82**, 541 (2002).
- [42] T. Mura. *Micromechanics of defects in solids*. Martinus Nijhoff, Dordrecht (1987).
- [43] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, Yu.I. Meshcheryakov. J. Phys. III (France) **3**, 1563 (1993).