

# Рост зерен и коллективная миграция их границ при пластической деформации нанокристаллических материалов

© М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, 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 12 ноября 2007 г.)

Предложена теоретическая модель коллективной миграции двух соседних границ зерен в нанокристаллическом материале под действием приложенного упругого напряжения. На основе анализа изменения энергии системы показано, что в зависимости от уровня приложенного сдвигового напряжения и углов разориентировки границы зерен могут оставаться неподвижными или мигрировать навстречу друг другу. Процесс миграции может быть устойчивым, когда границы занимают равновесные положения, отвечающие минимуму энергии системы и соответствующие относительно невысокому уровню приложенного напряжения, или неустойчивым, когда при относительно высоких напряжениях смещение границ сопровождается постоянным понижением энергии системы и становится неуправляемым. Устойчивая миграция границ приводит к уменьшению размера ограниченного ими зерна за счет роста соседних зерен и может завершиться полной или частичной аннигиляцией границ и исчезновением этого зерна. Неустойчивая миграция ведет либо к аннигиляции границ, либо к их прохождению сквозь друг друга, что может рассматриваться как исчезновение старого зерна, зарождение и неограниченный рост нового.

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 (grant N RUE2-2684-ST-05) и Санкт-Петербургского научного центра РАН.

PACS: 61.72.Bb, 61.72.Lk, 61.72.Mm, 62.20.Fe, 62.25.+g

## 1. Введение

Считается надежно установленным, что необычно высокие механические свойства нанокристаллических материалов в основном обусловлены специфическими механизмами пластической деформации, тесно связанными с границами зерен (ГЗ) (см. обзоры и монографии [1–12]).

В ряду прочих механизмов пластичности, контролируемых ГЗ, особое внимание в последние годы привлекает рост зерен в процессе пластической деформации ультрамелкозернистых [13–16] и нанокристаллических [13–27] металлов и сплавов при комнатной [13–27] и криогенных [16–18] температурах. Экспериментальные исследования, проведенные на ультрамелкозернистых чистых Al [13–15], Cu [16] и сплавах Al–Mg [14], а также на нанокристаллических чистых Al [13–15,22,23], Cu [16–18], Ni [19–21] и сплавах Co–P [24,25] и Ni–Fe [25–27], показали, что рост зерен возможен при нано- [13–15,20] и микроиндентировании [16–18] тонких пленок, при их кручении под высоким давлением [19], при одноосном сжатии микростолбиков [21] и макрообразцов [26] и наконец при одноосном растяжении тонких пленок [22,23] или массивных плоских образцов [24,25,27].

Для понимания физической природы этого явления важны следующие экспериментальные факты:

1) при криогенных температурах зёрна растут быстрее, чем при комнатной [17];

2) наиболее интенсивно рост зерен происходит в тех областях образца, где достигаются наибольшие упругие напряжения и их градиенты (например, под наноиндентором [13–15,20]) или в непосредственной близости от микроиндентора [16–18], вблизи вершины медленно растущей трещины [22] и в приповерхностных слоях образца в районе шейки при растяжении [27]);

3) рост зерен можно полностью подавить [14] или существенно снизить [24–27] добавлением примесей;

4) в процессе роста зерен меняется не только их размер, но и характер распределения зерен по размерам — распределения становятся шире, иногда превращаются в бимодальные [17,22,25], когда значительно большие субмикронные зерна, занимающие до 15% объема [17], окружены мелкими нанозернами;

5) рост зерен наблюдается при относительно низких скоростях наноиндентирования [20] и при микроиндентировании в режиме ползучести [16–18], при относительно высоких скоростях сжатия ( $\sim 10^{-3}–10^{-1} \text{ s}^{-1}$  [21] и  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$  [26]) и в широком диапазоне скоростей растяжения ( $\sim 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  [22,23],  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$  [23,24],  $10^{-5}–10^{-2} \text{ s}^{-1}$  [25],  $10^{-2} \text{ s}^{-1}$  [27]);

6) рост зерен приводит к некоторому снижению предела прочности, но к существенному увеличению предельного удлинения при растяжении (до 25% в нанокристаллическом чистом Al [22] и до 7.2% в нанокристаллическом сплаве Ni–Fe [27]), что сопровождается заметным упрочнением и формированием

дислокационных структур в крупных зернах; при одноосном сжатии микростолбиков чистого нанокристаллического Ni наблюдалась ультравысокая пластичность до 200% истинной деформации при напряжении течения 2.0–2.4 GPa, что сопровождалось сначала разупрочнением, вызванным равноосным ростом зерен, а затем упрочнением, связанным с удлинением выросших зерен и с накоплением в них дислокаций и двойников [21];

7) с увеличением времени выдержки под индентором наблюдалось увеличение числа малоугловых ГЗ, особенно при криогенных температурах [18], а в субмикронных зернах, выросших в процессе интенсивной пластической деформации, наблюдались субзерна, в свою очередь заполненные дислокационными ячейками [19].

По единодушному мнению авторов [13–27], перечисленные результаты однозначно указывают на атермический характер роста зерен, который реализуется под действием упругих напряжений, формирующихся на ранних стадиях пластического течения. Процесс роста сильно неоднороден по сечению образца, что указывает на укрупнение тех зерен, которые, во-первых, расположены в местах концентрации напряжений, а во-вторых, имеют благоприятную ориентацию. При достижении растущими зернами размеров порядка сотен нанометров в них активизируются механизмы пластичности, обычные для низкотемпературной деформации крупнозернистых металлов (например, в меди при комнатной температуре наблюдались преимущественное скольжение дислокаций и образование дислокационных рядов, а при криогенной температуре (77 K) — деформационное двойникование [18]). Таким образом, рост зерен при пластической деформации естественным образом повышает пластичность нанокристаллических металлов, с сохранением высоких напряжений течения при низких температурах и относительно высоких скоростях нагружения, что чрезвычайно важно для их практического использования [15].

Явление роста зерен при комнатной температуре наблюдалось и раньше как после выдержки в течение нескольких дней образцов нанокристаллических металлов после компактирования [28–30], так и непосредственно в процессе одноосного прессования особо чистого нанокристаллического алюминиевого порошка [31] или при одноосном сжатии образцов ультрамелкозернистой меди [32], полученных методом равноканального углового прессования. При этом рост зерен рассматривался как термически активированный процесс, стимулированный особенностями строения ГЗ в таких материалах [28–30,32] или отсутствием примесей, способных закреплять ГЗ [31].

Отметим, что недавно наблюдался существенный рост зерен в процессе сверхпластической деформации нанокерамики Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, деформируемой сжатием при 1500°C [33]. При меньшей скорости деформации ( $3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ) распределение зерен по размерам становилось бимодальным, когда значительная часть изначально

равноосных зерен со средним размером 68 nm разрасталась в одном из направлений в среднем до 145 nm. При более высокой скорости деформации ( $10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ) рост зерен был не таким значительным, распределение зерен по размерам оставалось одномодальным, а зерна удлинялись в среднем до 89 nm, также приобретая стержнеобразную форму.

Недавние работы по компьютерному моделированию миграции ГЗ [34–39] и роста зерен [35–38] в нанокристаллических металлах под действием приложенного напряжения при комнатной [34–37] и нулевой [38,39] температурах показали атермическую природу этих процессов при пластической деформации. Основными механизмами роста зерен оказались стимулированные напряжением миграция ГЗ и их тройных стыков, зернограничное проскальзывание, вращение зерен и их коалесценция. В частности, наблюдалось совместное действие всех этих механизмов в модельных образцах нанокристаллических Ni [37] и Al [38] со средними размерами зерна соответственно 5 и 7 nm, когда нанозерна под действием одноосного растяжения [37] или наноиндентора [38] вращались, проскальзывая по границам с соседними зернами. При этом разориентировка одной из границ существенно уменьшалась, граница превращалась из большеугловой с углом разориентировки  $\theta \approx 22^\circ$  в малоугловую с  $\theta \approx 13^\circ$  и начинала свободно мигрировать за счет скольжения составляющих ее дислокаций в тело одного из зерен [38]. Процесс заканчивался поглощением этих дислокаций противоположной границей зерна и превращением двух соседних зерен в одно. Похожие ситуации наблюдались и при моделировании одноосного растяжения нанокристаллического Al со средним размером зерна 5 nm при комнатной температуре [40]. Аналогичные процессы вращения и коалесценции нанозерен изучались путем компьютерного моделирования деформации нанокристаллического Pd со средним размером зерна 15 nm при температуре 1200 K [41].

Для теоретического описания миграции ГЗ и роста зерен в пластически деформируемых нанокристаллических материалах было также предложено несколько континуальных дислокационно-дисклинационных моделей [42–45]. Так, динамика и распад малоугловой границы наклона под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$  исследовались в работах [42,43]. Было показано, что по мере увеличения  $\tau$  граница сначала прогибается, затем смещается в новые положения, соответствующие приложенному напряжению, а при некотором критическом напряжении, пропорциональном углу ее разориентировки, теряет устойчивость и начинает необратимое скольжение. Распад первой такой границы существенно снижает критические напряжения для распада соседних малоугловых границ, что приводит к цепной реакции распада соседних границ и коалесценции разделяемых ими зерен. Статическая модель выхода дислокаций из бесконечной прямолинейной дислокационной стенки [44] также позволяет оценить критическое

напряжение распада границы, прямо пропорциональное углу ее разориентировки. Несмотря на очевидную грубость модели [44], полученная оценка напряжения, необходимого для отрыва от границы с углом разориентировки  $\theta = 0.1 (\approx 5.7^\circ)$  одной собственной дислокации (в случае Fe оно составляет примерно 2 GPa), не слишком превышает результат динамического расчета (1.53 GPa) [42,43]. В рамках модели [44] были получены и более низкие значения критического напряжения распада границы для случаев, когда из нее выходят сразу несколько собственных или избыточных дислокаций. Однако корректность использования таких ситуаций для описания распада границ, когда допускается движение только отдельных дислокаций, а положение остальных остается неизменным, вызывает сомнение.

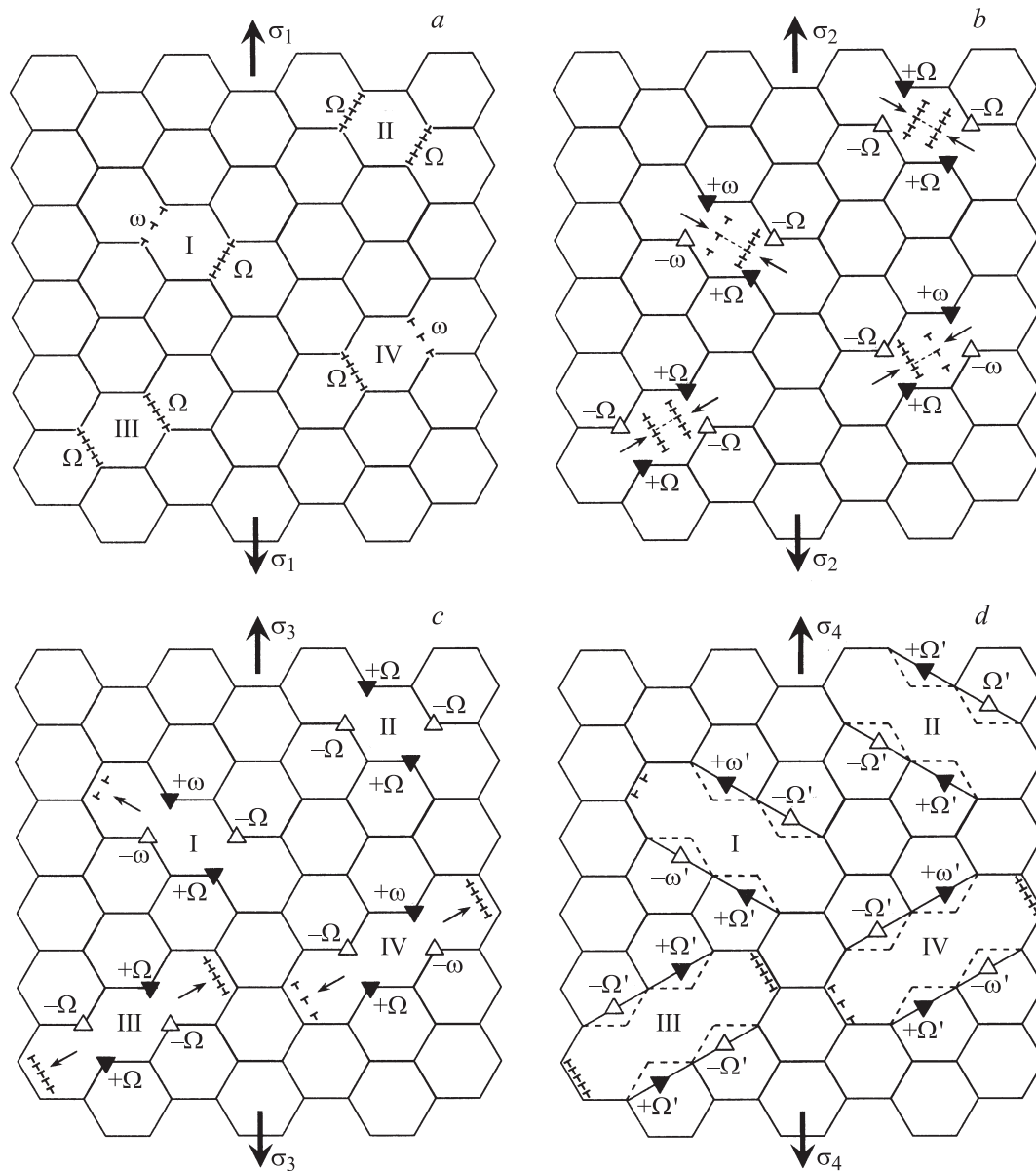
Для континуального описания миграции произвольной границы наклона была предложена дисклинационная модель [45]. Мигрирующая граница моделировалась двухосным диполем частичных клиновых дисклинаций, способным перемещаться под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$  в упругом поле такого же дисклинационного диполя противоположного знака, который образовался в момент отрыва границы от соседних ГЗ (т.е. в момент превращения тройных стыков ГЗ в двойные). Сам механизм перемещения большеугловой границы при этом не рассматривался, поскольку его корректное описание возможно только в рамках атомных моделей [46–48]. Оказалось, что возможны два режима миграции ГЗ: при достижении приложенным напряжением первого критического значения  $\tau_{c1}$  ГЗ начинает мигрировать в устойчивом режиме, когда ее равновесное положение определяется уровнем  $\tau \geq \tau_{c1}$ ; если же  $\tau$  доходит до второго критического значения  $\tau_{c2}$ , то миграция ГЗ становится неустойчивой — равновесное положение границы исчезает и ее миграция перестает зависеть от уровня  $\tau$ . Для обоих критических напряжений  $\tau_{c1}$  и  $\tau_{c2}$  были получены аналитические выражения и численные оценки. Например, для чистого нанокристаллического Al с размерами зерна  $d$  от 30 до 100 nm уровень  $\tau_{c1}$  составлял от 7.6 до 23.5 МПа при  $\theta \approx 5^\circ$  и от 46.5 до 144 МПа при  $\theta \approx 30^\circ$ . Величина  $\tau_{c2}$  оказалась существенно большей: 0.4 GPa при  $\theta \approx 5^\circ$  и 2.5 GPa при  $\theta \approx 30^\circ$ , независимо от размера зерна. Заметим, что интенсивный рост зерна при растяжении тонких пленок нанокристаллического Al начинался в диапазоне истинных растягивающих напряжений от 130 МПа при  $d \approx 90$  nm до 190 МПа при  $d \approx 40$  nm [22,23], что соответствует максимальным значениям  $\tau$  от 65 до 95 МПа, т.е. определено в интервале  $\tau_{c1} < \tau < \tau_{c2}$  для ГЗ с углом разориентировки  $\theta \approx 5^\circ$  и в части этого интервала для ГЗ с  $\theta \approx 30^\circ$ . Компьютерное моделирование наноиндентирования нанокристаллических пленок Al со средним размером зерна 7 nm показало [38], что миграция малоугловой границы наклона с углом разориентировки  $13.5^\circ$  переходит в неустойчивый режим при локальных сдвиговых напряжениях, совпадающих по величине с оценкой 0.7 GPa, полученной по формуле для  $\tau_{c2}$  из работы [45].

Цель настоящей работы — обобщение дисклинационной модели [45] на случай коллективной миграции двух противоположных границ зерна и континуальное описание роста зерен как особого механизма пластической деформации в нанокристаллических материалах.

## 2. Модель

Рассмотрим модель нанокристаллического материала, к которому приложено некоторое нормальное напряжение  $\sigma_1$  (рис. 1, *a*). Знак напряжения никакой роли не играет, но для определенности здесь выбран случай одноосного растяжения. Выделим из общей массы нанозерен, попавших в поле рисунка, четыре зерна, обозначенных римскими цифрами I–IV. Положим, что эти зерна ограничены границами наклона с относительно небольшими углами разориентировки  $\omega$  и  $\Omega$ , меньшими углов разориентировки остальных границ. Для большей наглядности модели предполагается, что эти углы меньше  $15^\circ$ , тогда эти границы можно рассматривать как стенки краевых решеточных дислокаций. Как видно из рис. 1, *a*, зерна I и IV ограничены дислокационными стенками с разными периодами и соответственно с разными углами разориентировки  $\omega$  и  $\Omega$ , а зерна II и III — стенками с одинаковыми периодами, соответствующими углу разориентировки  $\Omega$ . При этом все тройные стыки этих стенок с соседними ГЗ считаются скомпенсированными, т.е. не содержат стыковых дисклинаций. Отметим, что в настоящей работе рассматривается коллективная миграция только ГЗ „противоположных знаков“. В случае малоугловых границ наклона это означает, что векторы Бюргера дислокаций, составляющих противоположные стенки, направлены в противоположные стороны. Кроме того, предполагается, что плоскости скольжения дислокаций, составляющих противоположные границы зерен I и II, совпадают, а плоскости скольжения дислокаций из противоположных границ зерен III и IV — нет. Ориентация дислокаций в этих границах выбрана такой, чтобы под действием приложенного растягивающего напряжения границы одного зерна мигрировали навстречу друг другу, поскольку в этом случае взаимное притяжение ГЗ противоположных знаков облегчает их миграцию.

Пока приложенное напряжение  $\sigma_1$  не достигнет некоторого критического значения, все ГЗ находятся в своих исходных положениях (рис. 1, *a*). При некотором напряжении  $\sigma_2$ , большем этого критического напряжения, ГЗ начинают миграцию под действием соответствующих сдвиговых напряжений в плоскостях скольжения составляющих их дислокаций. Сначала смещаются с исходных положений границы с меньшим углом разориентировки  $\omega$  ( $\omega$ -границы) [42–45], а затем, при еще большем уровне напряжения  $\sigma_2$ , — и границы с большим углом разориентировки  $\Omega$  ( $\Omega$ -границы). На рис. 1, *b* схематично показана ситуация, соответствующая устойчивой миграции  $\omega$ - и  $\Omega$ -границ, когда их равновесные положения определяются уровнем действующего сдвигово-



**Рис. 1.** Рост зерен за счет коллективной миграции границ в модельном нанокристаллическом материале при одноосном растяжении. *a* — исходное состояние границ наклона с углами разориентировки  $\omega$  и  $\Omega$  при низком растягивающем напряжении  $\sigma_1$ ; *b* — при некотором напряжении  $\sigma_1 > \sigma_2$  границы начинают мигрировать внутрь зерен I–IV, а в образовавшихся двойных стыках появляются частичные клиновые дисклинации с мощностями  $\pm\omega$  и  $\pm\Omega$ , формирующие дипольные и квадрупольные структуры; *c* — при более высоком напряжении  $\sigma_3 > \sigma_2$  некоторые границы частично (зерно I) или полностью (зерно II) аннигилируют, а другие проходят сквозь друг друга и останавливаются только у следующих границ (зерна III и IV); *d* — выравнивание границ разросшихся зерен I–IV при напряжении  $\sigma_4 \geq \sigma_3$ .

го напряжения  $\tau$  (из симметрии рисунка видно, что оно здесь одинаково для всех мигрирующих границ). После смещения  $\omega$ - и  $\Omega$ -границ со своих исходных позиций на прежде тройных, а теперь двойных стыках образуются стыковые частичные клиновые дисклинации с мощностями (величинами вектора Франка) соответственно  $\pm\omega$  и  $\pm\Omega$  [42,43,45]. Формируется характерная диполь-квадрупольная структура стыковых дисклинаций, каждый диполь которой притягивает назад „свою“ гра-

ницу и отталкивает противоположную. Баланс этих сил притяжения–отталкивания с силами взаимодействия между мигрирующими границами и с силой внешнего напряжения определяет равновесное положение каждой из мигрирующих границ.

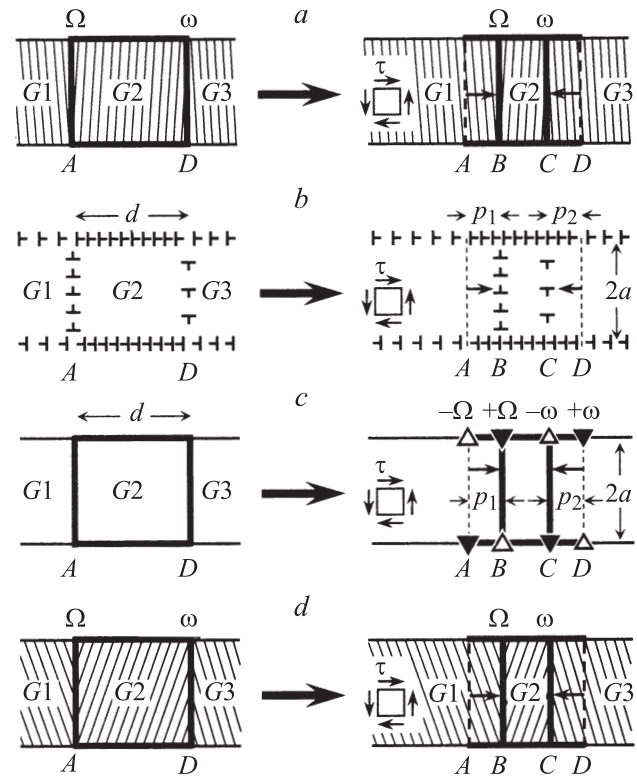
По мере роста уровня напряжения  $\sigma_2$  (и соответственно уровня  $\tau$ ) мигрирующие границы сближаются и наконец при некотором напряжении  $\sigma_3$  встречаются друг с другом. Результатом их встречи могут быть частичная

(зерно I) или полная (зерно II) аннигиляция границ, если составляющие их дислокации скользили по одним плоскостям скольжения, или прохождение границ сквозь друг друга (зерна III и IV), если эти плоскости не совпадали (рис. 1, *c*). Сохранившиеся после этих встреч дислокации накапливаются у противоположных границ разросшихся зерен I, III и IV.

Дальнейшая деформация образца стимулирует сглаживание границ выросших зерен I–IV (за счет уменьшения протяженности их общей границы) и соответствующее изменение мощности оставшихся стыковых дисклиниаций, которые теперь превращаются в зернограницные с мощностями  $\pm\omega'$  и  $\pm\Omega'$  (рис. 1, *d*). При этом эволюция дефектной структуры может включать, во-первых, перемещение этих дисклиниаций навстречу друг другу за счет испускания полных или частичных решеточных дислокаций в соседние зерна [49], а затем полную или частичную аннигиляцию этих дисклиниаций, и, во-вторых, дальнейшее разрастание и коалесценцию зерен. Например, поджатые к границам зерен III и IV дислокационные стенки могут вызывать миграцию этих границ.

В рамках настоящей работы рассмотрим более детально начальные стадии коллективной миграции двух противоположных границ одного зерна, полагая, что в первом приближении ситуация в пределах этого зерна развивается независимо от событий в соседних растущих зернах. Упрощенная модель трех соседних прямоугольных зерен  $G1$ – $G3$ , разделенных границами наклона  $G1/G2$  и  $G2/G3$ , показана на рис. 2. В случае малых углов разориентировки соответственно  $\Omega$  и  $\omega$  (рис. 2, *a*) эти границы представляют собой конечные периодические стенки полных решеточных дислокаций (рис. 2, *b*), которые при переходе к континуальной дисклинационной модели превращаются в двухосные диполи частичных клиновых дисклиниаций, мощности которых  $\pm\Omega$  и  $\pm\omega$  равны по абсолютной величине углам разориентировки дислокационных стенок (рис. 2, *c*). В случае больших углов разориентировки (рис. 2, *d*) эти границы можно сразу представить как дисклинационные диполи большей мощности (рис. 2, *c*). Под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$  границы  $G1/G2$  и  $G2/G3$  смещаются со своих исходных позиций  $A$  и  $D$  в новые положения  $B$  и  $C$ . При этом происходит пластическая деформация, связанная со скольжением решеточных дислокаций (в случае малых  $\Omega$  и  $\omega$ ) или с перемещением зернограницных дислокаций (в случае больших  $\Omega$  и  $\omega$ ) [46–48], и соответственно меняется ориентация кристаллической решетки в областях  $AB$  и  $CD$ , заметаемых мигрирующими границами (рис. 2). Таким образом, стимулированная напряжением миграция границ приводит к ротационной пластической деформации, связанной с поворотом кристаллической решетки.

По предположению, в исходном положении границ  $G1/G2$  и  $G2/G3$  их тройные стыки с соседними границами зерен  $G1$ – $G3$  являются геометрически скомпенсированными, т.е. не содержат стыковых дисклиниаций.



**Рис. 2.** Схема коллективной миграции малоугловых (*a, b*) и большеугловых (*c, d*) границ зерен, разделяющих зерна  $G1$ – $G3$ , под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$ . *a, d* — геометрические модели; *b, c* — дислокационная и дисклинационная модели соответственно.

При смещении границ  $G1/G2$  и  $G2/G3$  в новые положения  $B$  и  $C$  бывшие тройные стыки  $A$  и  $D$  становятся двойными и нескомпенсированными — в них возникают нескомпенсированные скачки углов разориентировки (другими словами, скачки плотности зернограницных дислокаций, рис. 2, *b*) [42,43,45]. Так же и новые тройные стыки  $B$  и  $C$  оказываются нескомпенсированными. В теории дефектов такие нескомпенсированные стыки границ наклона описываются как частичные клиновые дисклинации с мощностями, равными скачкам угла разориентировки, — стыковые дисклинации [50,51]. Таким образом, переходя к континуальной дисклинационной описанию, получаем систему четырех двусосных диполей частичных клиновых дисклиниаций с мощностями  $\pm\Omega$  и  $\pm\omega$  (рис. 2, *c*). Диполи  $B$  и  $C$  подвижны, диполи  $A$  и  $D$  — нет. Для анализа возможного развития такой дисклинационной системы рассчитаем ее энергию и исследуем зависимость этой энергии от основных параметров модели.

### 3. Изменение полной энергии системы

Рассмотрим изменение полной энергии системы  $\Delta W$ , сопровождающее образование дисклинационной структуры, показанной на рис. 2, *c*. В расчете на единицу

длины дисклинаций его можно записать в виде

$$\Delta W = 2W_s^A + 2W_s^C + W_{\text{int}}^{AB} + W_{\text{int}}^{CD} + W_{\text{int}}^{AC} + W_{\text{int}}^{BD} + W_{\text{int}}^{BC} + W_{\text{int}}^{AD} - A, \quad (1)$$

где  $W_s^A$  и  $W_s^C$  — собственные упругие энергии дисклинационных диполей  $A$  и  $C$  (они соответственно равны собственным упругим энергиям диполей  $B$  и  $D$ , что учитывается множителем 2),  $W_{\text{int}}^{\alpha\beta}$  — энергия упругого взаимодействия между дисклинационными диполями  $\alpha$  и  $\beta$  ( $\alpha, \beta = A, B, C, D$ ),  $A$  — работа приложенного сдвигового напряжения  $\tau$  по зарождению всей этой дисклинационной структуры (т.е. работа по совершению пластической деформации, сопровождающей такую коллективную миграцию ГЗ). Слагаемые в правой части формулы (1) определяются следующими выражениями [52]:

$$W_s^A = D\Omega^2 a^2 \left( 2 \ln \frac{R}{2a} + 1 \right), \quad (2)$$

$$W_s^C = D\omega^2 a^2 \left( 2 \ln \frac{R}{2a} + 1 \right), \quad (3)$$

$$W_{\text{int}}^{AB} = -2D\Omega^2 a^2 \left( \ln \frac{R^2}{4a^2 + p_1^2} - \frac{p_1^2}{4a^2} \ln \frac{4a^2 + p_1^2}{p_1^2} + 1 \right), \quad (4)$$

$$W_{\text{int}}^{CD} = -2D\omega^2 a^2 \left( \ln \frac{R^2}{4a^2 + p_2^2} - \frac{p_2^2}{4a^2} \ln \frac{4a^2 + p_2^2}{p_2^2} + 1 \right), \quad (5)$$

$$W_{\text{int}}^{AC} = 2D\omega\Omega a^2 \left( \ln \frac{R^2}{4a^2 + (d-p_2)^2} - \frac{(d-p_2)^2}{4a^2} \ln \frac{4a^2 + (d-p_2)^2}{(d-p_2)^2} + 1 \right), \quad (6)$$

$$W_{\text{int}}^{BD} = 2D\omega\Omega a^2 \left( \ln \frac{R^2}{4a^2 + (d-p_1)^2} - \frac{(d-p_1)^2}{4a^2} \ln \frac{4a^2 + (d-p_1)^2}{(d-p_1)^2} + 1 \right), \quad (7)$$

$$W_{\text{int}}^{BC} = -2D\omega\Omega a^2 \left( \ln \frac{R^2}{4a^2 + (d-p_1-p_2)^2} - \frac{(d-p_1-p_2)^2}{4a^2} \ln \frac{4a^2 + (d-p_1-p_2)^2}{(d-p_1-p_2)^2} + 1 \right), \quad (8)$$

$$W_{\text{int}}^{AD} = -2D\omega\Omega a^2 \left( \ln \frac{R^2}{4a^2 + d^2} - \frac{d^2}{4a^2} \ln \frac{4a^2 + d^2}{d^2} + 1 \right), \quad (9)$$

$$A = 2a\tau(\Omega p_1 + \omega p_2), \quad (10)$$

где  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ ,  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $2a$  — плечо дисклинационного диполя ( $A, B, C$  и  $D$ ),  $R$  — параметр экранировки дальнего упругого поля диполя [50],  $p_1$  и  $p_2$  — расстояния, пройденные соответственно мигрирующими границами  $G1/G2$  и  $G2/G3$ ,  $d$  — начальная длина

зерна  $G2$ . Подстановка (2)–(10) в (1) дает окончательное выражение для изменения энергии системы  $\Delta W$ :

$$\Delta W = 2Da^2\Omega^2 \left\{ (x^2 + 1) \ln(x^2 + 1) - x^2 \ln x^2 + \lambda^2 [(y^2 + 1) \ln(y^2 + 1) - y^2 \ln y^2] + \lambda \{ (z^2 + 1) \ln(z^2 + 1) - z^2 \ln z^2 + [(z-x-y)^2 + 1] \ln[(z-x-y)^2 + 1] - (z-x-y)^2 \ln(z-x-y)^2 - [(z-x)^2 + 1] \times \ln[(z-x)^2 + 1] + (z-x)^2 \ln(z-x)^2 - [(x-y)^2 + 1] \ln[(x-y)^2 + 1] + (z-y)^2 \ln(z-y)^2 \} - \frac{2\tau}{D\Omega} (x + \lambda y) \right\}. \quad (11)$$

Здесь  $x = p_1/2a$ ,  $y = p_2/2a$ ,  $z = d/2a$ ,  $\lambda = \omega/\Omega$  — безразмерные параметры модели.

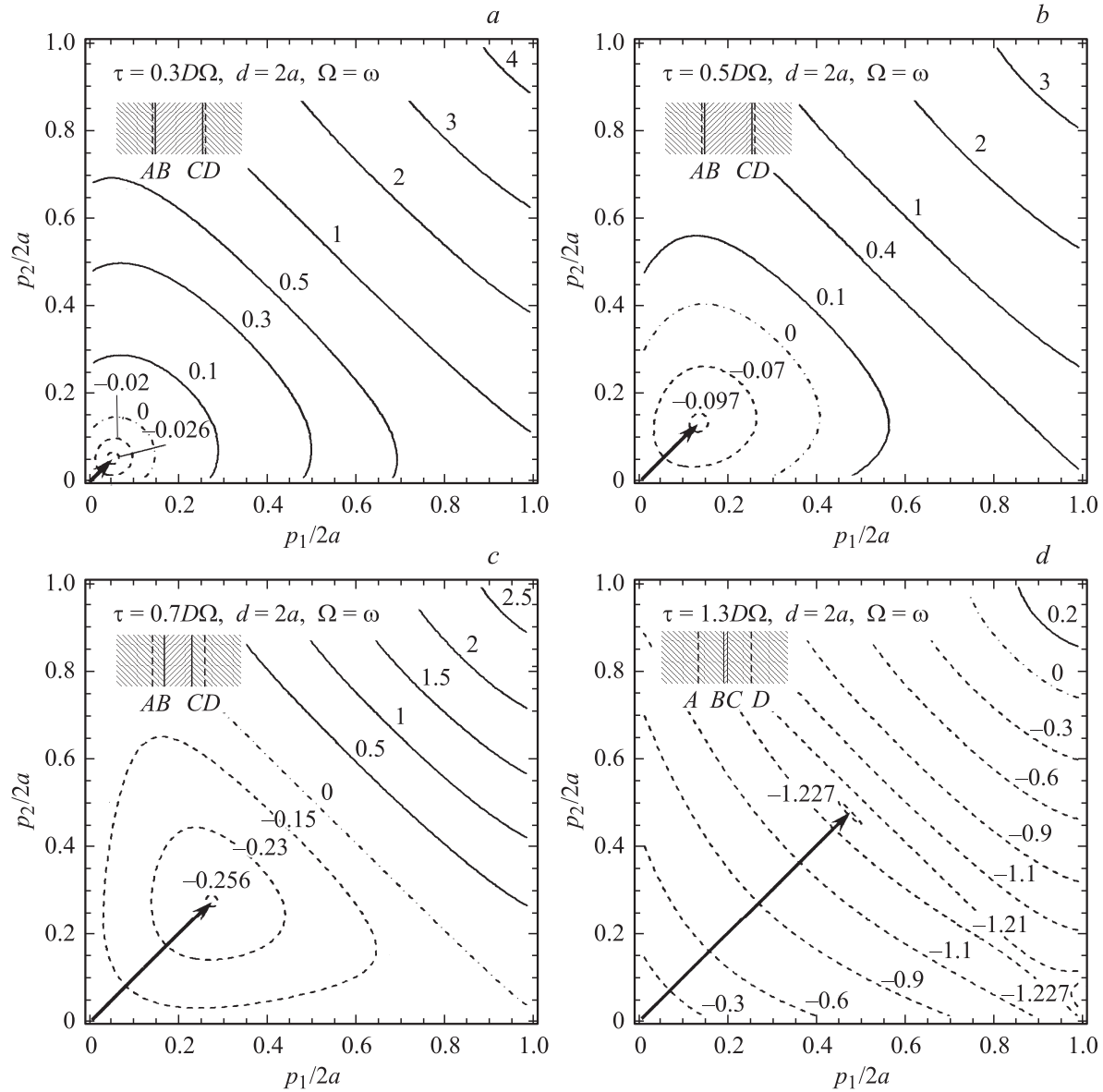
#### 4. Описание роста зерен

Поскольку изменение энергии  $\Delta W$  зависит от двух переменных,  $x$  и  $y$ , его поведение удобно исследовать с помощью карт изолиний  $\Delta W(x, y) = \text{const}$ . Для определенности рассмотрим случай изначально одноосного зерна  $G2$  ( $z = 1$ ).

4.1. Коллективная миграция границ с равными углами разориентировки ( $\lambda = 1$ ). Предположим сначала, что углы разориентировки границ  $G1/G2$  и  $G2/G3$  равны:  $\lambda = 1$ . Карты изолиний  $\Delta W(x, y) = \text{const}$ , построенные в этом случае для значений приложенного напряжения  $\tau$  от  $0.3D\Omega$  до  $2.5D\Omega$ , приведены на рис. 3 и 4. Значения  $\Delta W$  на изолиниях даны в единицах  $2Da^2\Omega^2$ . На картах сделаны вставки, которые схематично изображают равновесную конфигурацию системы трех соседних зерен, соответствующую данному уровню напряжения  $\tau$ . Жирные стрелки, проведенные из начальной точки примерно вдоль линии максимального по величине градиента  $\Delta W$ , указывают траекторию развития системы в пространстве переменных  $x$  и  $y$ . Как видно из рис. 3 и 4, вид функции  $\Delta W(x, y)$  и развитие ситуации в целом очень сильно зависят от уровня напряжения  $\tau$ .

Пока напряжение  $\tau$  очень мало (здесь  $\tau < 0.3D\Omega$ ), значения функции  $\Delta W(x, y)$  везде положительны и монотонно возрастают с ростом переменных  $x$  и  $y$  (эти карты здесь не приводятся). Это означает, что при таком  $\tau$  образование дисклинационной конфигурации  $ABCD$  энергетически невыгодно. Другими словами, в рамках данной модели такого уровня приложенного напряжения  $\tau$  недостаточно, чтобы стимулировать миграцию границ  $G1/G2$  и  $G2/G3$  и разрастание зерен  $G1$  и  $G3$ .

В областях несколько больших, но все еще относительно малых значений  $\tau$ , от  $3D\Omega$  до  $1.3D\Omega$  (рис. 3),



**Рис. 3.** Карты изолиний изменения энергии  $\Delta W$  в пространстве относительных смещений ( $x = p_1/2a$ ,  $y = p_2/2a$ ) мигрирующих границ с одинаковыми углами разориентировки ( $\Omega = \omega$ ) при различных значениях приложенного напряжения  $\tau/(D\Omega) = 0.3$  (a), 0.5 (b), 0.7 (c), 1.3 (d). Значения изменения энергии  $\Delta W$  даны в единицах  $2Da^2\Omega^2$ . Вставки схематично показывают равновесную конфигурацию системы трех соседних зерен, соответствующую данному уровню напряжения  $\tau$ . Жирные стрелки указывают примерную траекторию устойчивого развития системы в пространстве переменных  $x$  и  $y$ .

функция  $\Delta W(x, y)$  при малых  $x$  и  $y$  принимает отрицательные значения, а при больших — положительные. На линии  $x = y$  она достигает минимальных значений, которые соответствуют равновесным состояниям системы (на рис. 3 на эти точки указывают жирные стрелки). Это означает, что по мере роста уровня напряжения  $\tau$  границы  $G1/G2$  и  $G2/G3$  постепенно мигрируют навстречу друг другу, соответственно смещаясь со своих исходных позиций  $A$  и  $D$  в равновесные положения  $B$  и  $C$ . Поскольку в данном расчете принято, что  $\lambda = 1$ , границы  $G1/G2$  и  $G2/G3$  одинаковы и смещаются на равные расстояния. Из-за этого же карты изолиний сим-

метричны относительно диагонали, соединяющей точки  $(0, 0)$  и  $(1, 1)$ . Например, при  $\tau/D\Omega = 0.3$  безразмерные равновесные смещения границ принимают значения  $x = y \approx 0.05$  (рис. 3, a). При больших напряжениях  $\tau/D\Omega = 0.5$  (рис. 3, b), 0.7 (рис. 3, c) и 1.3 (рис. 3, d) они соответственно составляют  $x = y \approx 0.13$ , 0.28 и 0.48. Из вставок видно, что при этом боковые зерна разрастаются навстречу друг другу, поглощая центральное зерно  $G2$  (ограниченное линиями  $B$  и  $C$ ). Полное поглощение этого зерна происходит при встрече границ  $G1/G2$  и  $G2/G3$  (в точке  $x = y = 0.5$ ) под действием напряжения  $\tau = \tau_m \approx 1.6D\Omega$  (на рис. 3 не показано).

Используя выражение (11), можно аналитически оценить значения критического напряжения  $\tau_c$ , при котором становится возможной миграция границ  $G1/G2$  и  $G2/G3$ , и характерного напряжения  $\tau_m$ , при котором эти границы могут встретиться. Для оценки  $\tau_c$  положим в (11), что  $x = y, z = 1, \lambda = 1$  и  $x \ll 1$ . Тогда имеем

$$\Delta W(x = y, z = 1, \lambda = 1, x \ll 1) \approx -8Da^2\Omega^2x \times \left( x + x \ln x + \frac{\tau}{D\Omega} \right). \quad (12)$$

Элементарная миграция ГЗ на одно межатомное расстояние  $b$  возможна, если изменение энергии при этом будет отрицательным:  $\Delta W(x = b/2a) < 0$ . Тогда равенство  $\Delta W(x = b/2a) = 0$  позволяет определить критическое напряжение  $\tau_c$ :

$$\tau_c \approx \frac{D\Omega b}{2a} \left( \ln \frac{2a}{b} - 1 \right). \quad (13)$$

Если в этом выражении пренебречь единицей в скобках, то получим оценку, сделанную в работе [45] для первого критического напряжения  $\tau_{c1}$ , необходимого для начала миграции отдельно взятой границы. Таким образом, в первом приближении критические напряжения  $\tau_c$  и  $\tau_{c1}$  совпадают. Более точный расчет по формулам работы [45] дает оценку

$$\tau_{c1} \approx \frac{D\Omega b}{2a} \left( \ln \frac{2a}{b} + \frac{1}{2} \right). \quad (14)$$

Разность напряжений  $\Delta\tau_c = \tau_{c1} - \tau_c \approx 3D\Omega b/(4a)$  определяет степень влияния упругого взаимодействия между мигрирующими границами на критическое напряжение начала миграции. Очевидно, что оно становится существенным при малых размерах изначально одноосного зерна. Например, в чистом нанокристаллическом Al с упругими модулями  $G = 27$  GPa и  $\nu = 0.31$ , межатомным расстоянием  $b \approx 0.25$  nm и размером зерна  $d = 2a = 10$  nm эта разность критических напряжений для миграции границ наклона с углами разориентировки  $\Omega = 0.085$  ( $\approx 5^\circ$ ) и  $0.52$  ( $\approx 30^\circ$ ) составляет соответственно примерно 19.9 и 121.4 МПа, притом что сама величина критического напряжения  $\tau_c$  оказывается равной соответственно 35.6 и 217.7 МПа. Таким образом, не учитывая при таком малом размере зерна упругое взаимодействие мигрирующих границ, мы получили бы ошибку, примерно на 56% завышающую критическое напряжение начала миграции. Увеличив размер одноосного зерна в 10 раз, для тех же значений остальных параметров получаем ошибки 2.0 и 12.2 МПа при значениях  $\tau_c$ , равных 6.60 и 40.4 МПа, т.е. величина ошибки снизилась примерно до 30%.

Характерное напряжение  $\tau_m$ , при котором равновесным положением двух границ становится точка их

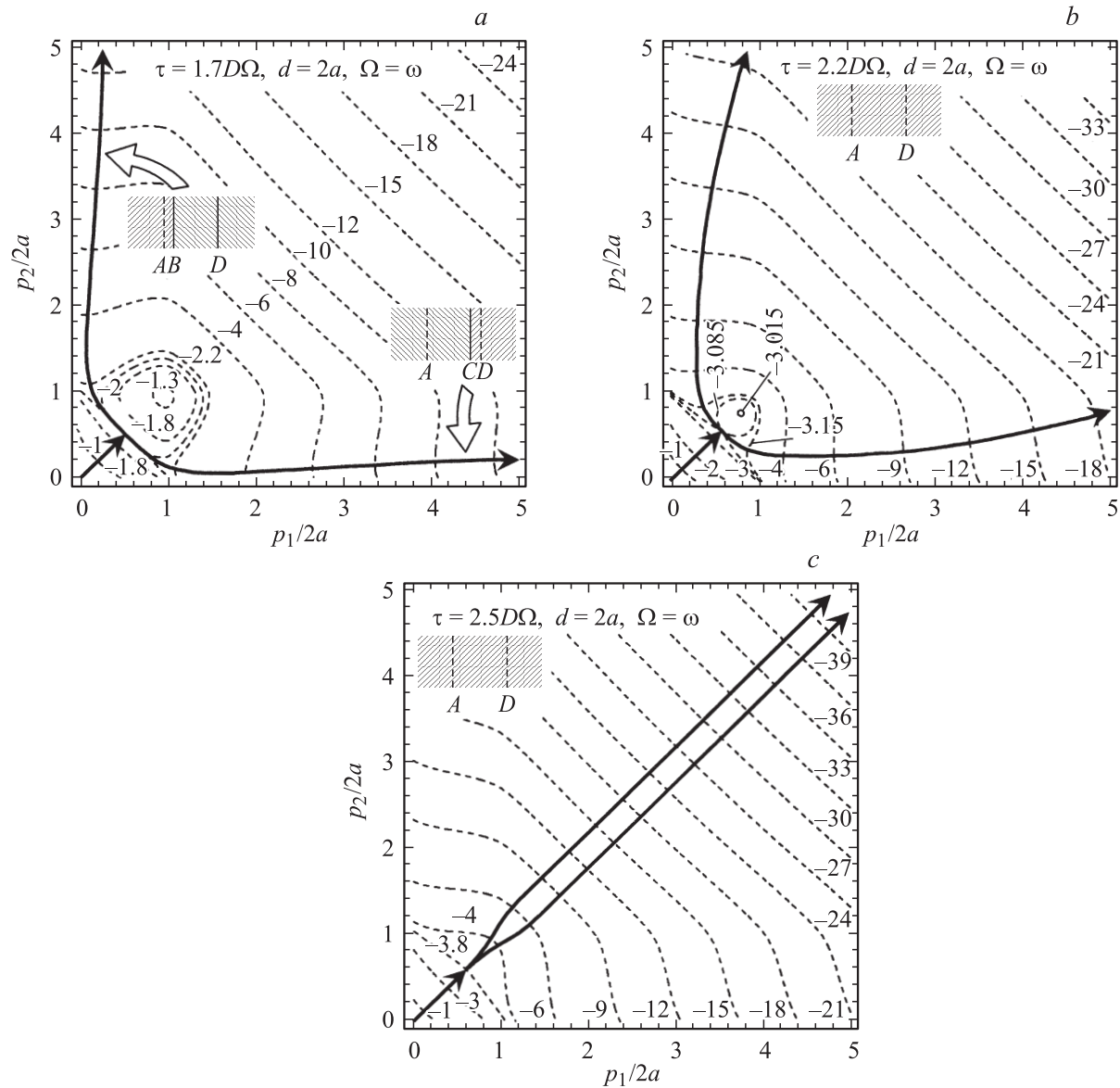
встречи  $x = y = 1/2$ , определим из условия минимума функции  $\Delta W(x, y)$  при  $x = y, z = 1, \lambda = 1$  и  $x = 1/2$

$$\frac{\partial \Delta W(x, z = 1, \lambda = 1)}{\partial x} \Big|_{x=1/2} = 8Da^2\Omega^2 \left( \ln 5 - \frac{\tau_m}{D\Omega} \right) = 0, \quad (15)$$

откуда сразу получаем  $\tau_m = D\Omega \ln 5 \approx 1.6D\Omega$ . Интересно, что эта величина в 2 раза превышает второе критическое напряжение  $\tau_{c2} \approx 0.8D\Omega$ , при котором отдельно взятая граница переходит от устойчивого режима миграции к неустойчивому в рамках модели [45]. Это обстоятельство связано с тем, что в модели [45] подвижный дисклинационный диполь, изображающий мигрирующую границу, в той же точке  $x = 1/2$  преодолевал максимальное притяжение со стороны неподвижного дисклинационного диполя, изображавшего двойные стыки ГЗ после отрыва от них (тогда еще тройных) мигрирующей границы. В настоящей модели при значениях параметров  $z = 1$  и  $\lambda = 1$  каждый из подвижных диполей испытывает в этой точке максимальную двойную силу сопротивления — от притяжения к „своему“ неподвижному диполю (т.е. к „своим“ двойным стыкам, от которых он оторвался) и от отталкивания противоположным неподвижным диполем (противоположными двойными стыками). Поскольку из-за симметрии такой ситуации ( $z = 1$  и  $\lambda = 1$ ) эти силы в точке  $x = 1/2$  равны, а сила притяжения между подвижными диполями обращается здесь в нуль, мы и получаем удвоение критического напряжения.

При использованных выше значениях параметров, взятых для чистого нанокристаллического Al, имеем  $\tau_m \approx 0.85$  GPa для  $\Omega = 0.085$  ( $\approx 5^\circ$ ) и  $\tau_m \approx 5.2$  GPa для  $0.52$  ( $\approx 30^\circ$ ). Первая из этих оценок хорошо согласуется с уровнем локальных (до 1.4 GPa) [38] и даже усредненных ( $\approx 0.8$  GPa) [40] сдвиговых напряжений в компьютерных моделях наноиндентирования при  $T = 0$  [38] и одноосного растяжения при  $T = 300$  K [40] чистого нанокристаллического Al со средним размером зерна 5–7 nm. Как уже отмечалось, при таких напряжениях авторы [38,40] наблюдали миграцию малоугловых границ и разрастание одних зерен за счет других. Вторая оценка дает, конечно, чрезмерно высокий уровень напряжений. Следовательно, можно заключить, что вряд ли можно ожидать такой встречи двух большеугловых границ при обычных условиях деформации, хотя это наблюдалось *in situ* прямо под острием наноиндентора в прямых экспериментах по наноиндентированию ультрамелкозернистых и нанокристаллических пленок чистого Al при комнатной температуре [13–15]. Можно предположить, что уровень контактных сдвиговых напряжений достигал в этом случае величины порядка 4–5 GPa, т.е. порядка теоретической прочности на сдвиг  $\approx G/(2\pi)$ . Напротив, коллективная миграция и встреча малоугловых границ требуют намного меньших сдвиговых напряжений и могут наблюдаться в обычных условиях деформирования.





**Рис. 4.** Карты изолиний изменения энергии  $\Delta W$  в пространстве относительных смещений ( $x = p_1/2a$ ,  $y = p_2/2a$ ) мигрирующих границ с одинаковыми углами разориентировки ( $\Omega = \omega$ ) при различных значениях приложенного напряжения  $\tau/(D\Omega) = 1.7$  (a), 2.2 (b), 2.5 (c). Значения изменения энергии  $\Delta W$  даны в единицах  $2Da^2\Omega^2$ . Вставки схематично показывают равновесную конфигурацию системы трех соседних зерен, соответствующую данному уровню напряжения  $\tau$ . Жирные стрелки указывают примерную траекторию неустойчивого развития системы с точки бифуркации в пространстве переменных  $x$  и  $y$ .

Возвращаясь к нашей модели, отметим, что до сих пор вплоть до своей встречи мигрирующие границы перемещались навстречу друг другу в устойчивом режиме, когда их положение определялось уровнем приложенного напряжения (рис. 3). Рассмотрим теперь, что может произойти при еще более высоких напряжениях (рис. 4). Как уже обсуждалось в разделе 2, при своей встрече мигрирующие границы с равными углами разориентировки ( $\lambda = 1$ ) могут либо полностью аннигилировать, либо просто пройти сквозь друг друга, как стенки дислокаций, скользящих навстречу друг другу по несовпадающим плоскостям. Первая возможность тривиальна — при полной аннигиляции происходит объединение зерен  $G1$

и  $G3$  в одно зерно. Второй случай можно рассматривать как зарождение и рост нового зерна, с той же ориентацией кристаллической решетки, какая была у зерна  $G2$ . При этом на диаграммах, изображающих наиболее вероятные траектории развития системы в пространстве  $(x, y)$ , в точках встречи границ происходит бифуркация — раздвоение начального участка траектории на две равновероятные ветви (рис. 4), соответствующие следующим двум возможным ситуациям.

1) Граница  $G1/G2$  (на вставке показана как линия  $B$ ) проходит сквозь границу  $G2/G3$  (на вставке показана как линия  $C$ ) и „захватывает“ ее, принуждая мигрировать вслед за собой. Между ними сохраняется некоторое

расстояние — толщина нового зерна. Таким образом, в течение некоторого времени новое зерно мигрирует как целое (см. участок жирной кривой со стрелкой в области  $0.5 < x < 1$  на рис. 4, *a*). Ведущая граница *B* и ведомая граница *C* совместно мигрируют до тех пор, пока граница *B* не достигает исходной позиции границы *C* в точке *D* и не пойдет дальше в глубь зерна *G3*, а следующая за ней граница *C* не остановится на некотором расстоянии от своей исходной позиции в точке *D* (рис. 4, *a*, участок жирной кривой со стрелкой в области  $1 \leq x \leq 5$ ). Это положение для границы *C* становится равновесным — ее притяжение „своими“ двойными стыками, расположенными в точке *D*, и отталкивание от противоположных двойных стыков, расположенных в точке *A*, уравниваются приложенным напряжением  $\tau = 1.7D\Omega$ . Это равновесие оказывается устойчивым — нужно сильно увеличить  $\tau$ , чтобы заставить границу *C* снова мигрировать к точке *A*. При  $\tau = 2.2D\Omega$  (рис. 4, *b*) так и происходит — граница *C* достигает точки *A* и идет дальше в глубь зерна *G1*. В итоге зерна *G1* и *G3* объединяются в одно зерно, но меняют при этом ориентацию кристаллической решетки — она становится такой же, какой была в центральном зерне *G2*. При еще более высоком напряжении  $\tau = 2.5D\Omega$  (рис. 4, *c*) границы *B* и *C* после встречи друг с другом просто продолжают мигрировать в прежнем направлении, с тем же конечным результатом. Никакого захвата границ и совместной их миграции в одном направлении при таком высоком приложенном напряжении уже не происходит.

2) Вторая ситуация прямо противоположна — здесь при относительно низких уровнях  $\tau$  происходит захват границы *B* границей *C* и их совместная миграция к точке *A* (рис. 4, *a*, верхняя жирная кривая со стрелкой). Дальше система развивается по тому же сценарию, что и в ситуации 1, только с заменой  $B \leftrightarrow C$ ,  $A \leftrightarrow D$  и  $G1 \leftrightarrow G3$ . Естественно, с тем же конечным результатом — объединением зерен *G1* и *G3* с заменой ориентации их решетки на исходную ориентацию решетки зерна *G2*.

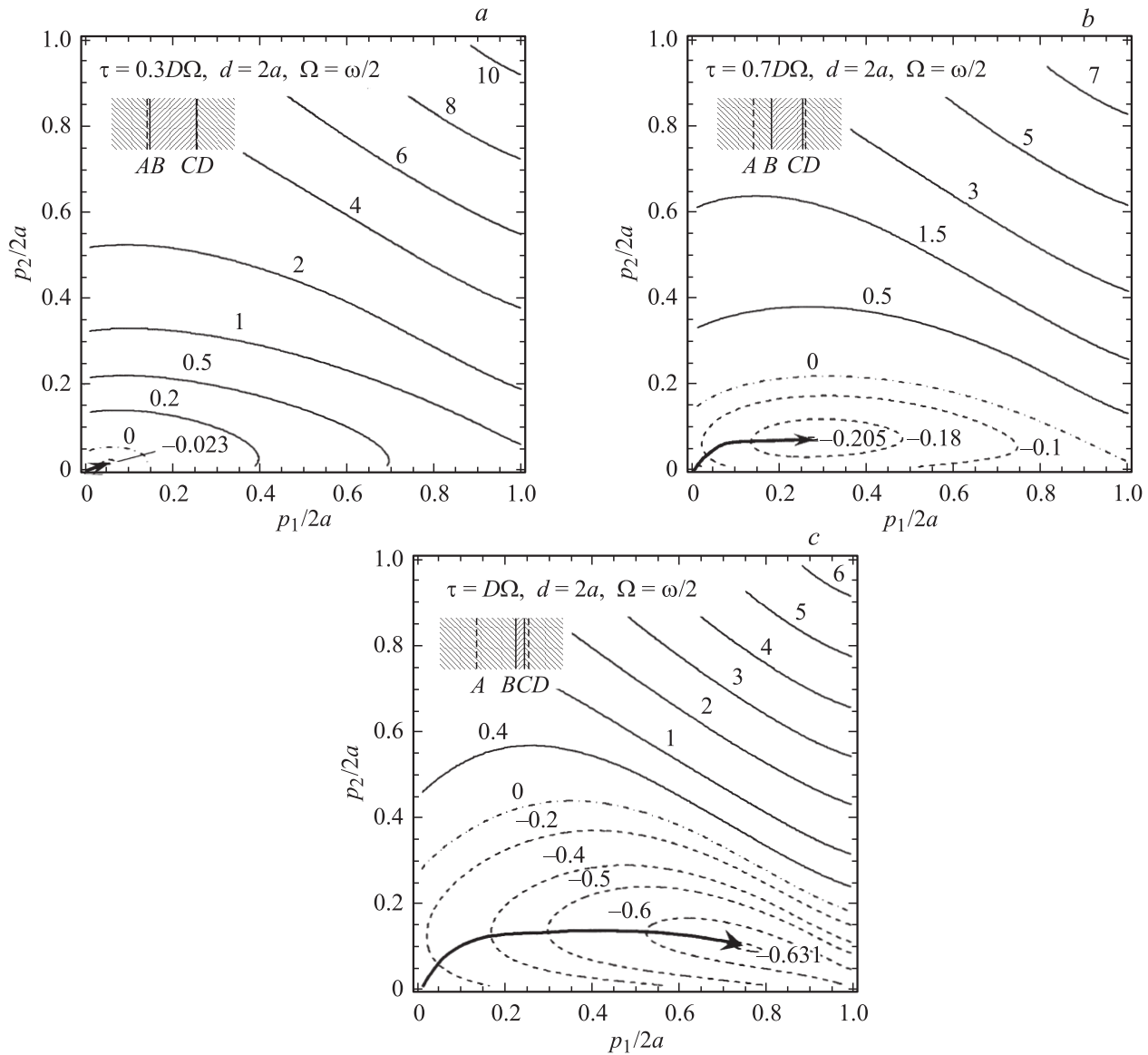
Таким образом, в случае изначально равноосного зерна *G2* ( $z = 1$ ) с одинаковыми боковыми границами ( $\lambda = 1$ ) можно ожидать следующего развития событий под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$ . При относительно малых напряжениях, больших некоторого критического ( $\tau > \tau_c$ ), границы *B* и *C* синхронно мигрируют навстречу друг другу, так что толщина зерна *G2* уменьшается с ростом  $\tau$ . При этом каждому значению  $\tau$  соответствует определенная равновесная толщина этого зерна. При определенном, достаточно высоком уровне напряжения  $\tau = \tau_m \approx 1.6D\Omega$  границы *B* и *C* встречаются и могут аннигилировать, что означает исчезновение зерна *G2* за счет разросшихся соседних зерен. Сделанные оценки показывают, что в случае малоугловых границ (дислокационных стенок) *B* и *C* это возможно при обычных условиях деформирования, а в случае большеугловых границ — только в условиях

сверхвысоких сдвиговых напряжений порядка теоретической прочности на сдвиг. Если границы не аннигилировали, то при еще более высоких напряжениях ( $\tau > \tau_m$ ) они проходят сквозь друг друга. Если уровень  $\tau$  остается порядка  $\tau_m$ , то одна граница захватывает другую, и они мигрируют вместе в одну сторону (происходит миграция зерна как целого) в неустойчивом режиме, пока ведущая граница не достигнет линии исходной границы зерна *G2*. Пройдя эту линию, ведущая граница отрывается от ведомой и продолжает дальнейшую неустойчивую миграцию, а ведомая граница остается в равновесном положении у линии исходной границы зерна *G2*. При более высоком уровне  $\tau$  эта ведомая граница теряет устойчивость и мигрирует в обратном направлении. Если же  $\tau$  существенно превышает  $\tau_m$ , то границы после встречи проходят сквозь друг друга и мигрируют в противоположном направлении в неустойчивом режиме. Итогом двух последних случаев становится объединение зерен *G1* и *G3* в одно зерно, с ориентацией решетки как у исходного зерна *G2*. Этот же результат можно рассматривать просто как неустойчивое разрастание зерна *G2* за счет соседних зерен *G1* и *G3*.

4.2. Коллективная миграция границ с разными углами разориентировки ( $\lambda = 2$ ).

Рассмотрим теперь случай изначально равноосного зерна ( $z = 1$ ), боковые границы которого *G1/G2* (*B*) и *G2/G3* (*C*) имеют разные углы разориентировки:  $\Omega = \omega/2$  или  $\lambda = 2$ . Если до сих пор мы не акцентировали внимание на том, являются ли рассматриваемые границы наклона симметричными или нет, то теперь нужно оговориться, что в данной ситуации по крайней мере одна из двух границ должна быть несимметричной. Например, в случае малоугловой границы это означает, что к периодической стенке краевых дислокаций нужно добавить еще периодический ряд краевых дислокаций с векторами Бюргерса, лежащими в плоскости границы. В силу симметрии выбранной модели относительно горизонтальной оси (рис. 2) добавление такого ряда к одной из вертикальных дислокационных стенок (рис. 2, *b*) или к одному из подвижных дисклинационных диполей (рис. 2, *c*) никак не влияет на выражение (11) для изменения энергии системы  $\Delta W$ . Поэтому в рамках настоящей модели, основанной на анализе поведения функции  $\Delta W(x, y)$ , несимметричность одной из мигрирующих границ никак не сказывается на результатах. В случае несимметричности сразу двух границ результаты могут измениться, но анализ такой ситуации выходит за рамки настоящей работы.

На рис. 5 показаны карты изолиний  $\Delta W(x, y) = \text{const}$ , построенные для относительно невысоких значений приложенного напряжения  $\tau$ . Видно, что карты утратили симметрию, присущую случаю  $\lambda = 1$  (рис. 3 и 4). Как указывает жирная кривая со стрелкой, миграция границ *B* и *C* происходит в устойчивом режиме — они занимают равновесные положения, соответствующие уровню  $\tau$ . При этом граница *B* с меньшим углом разориентировки обладает значительно более высокой



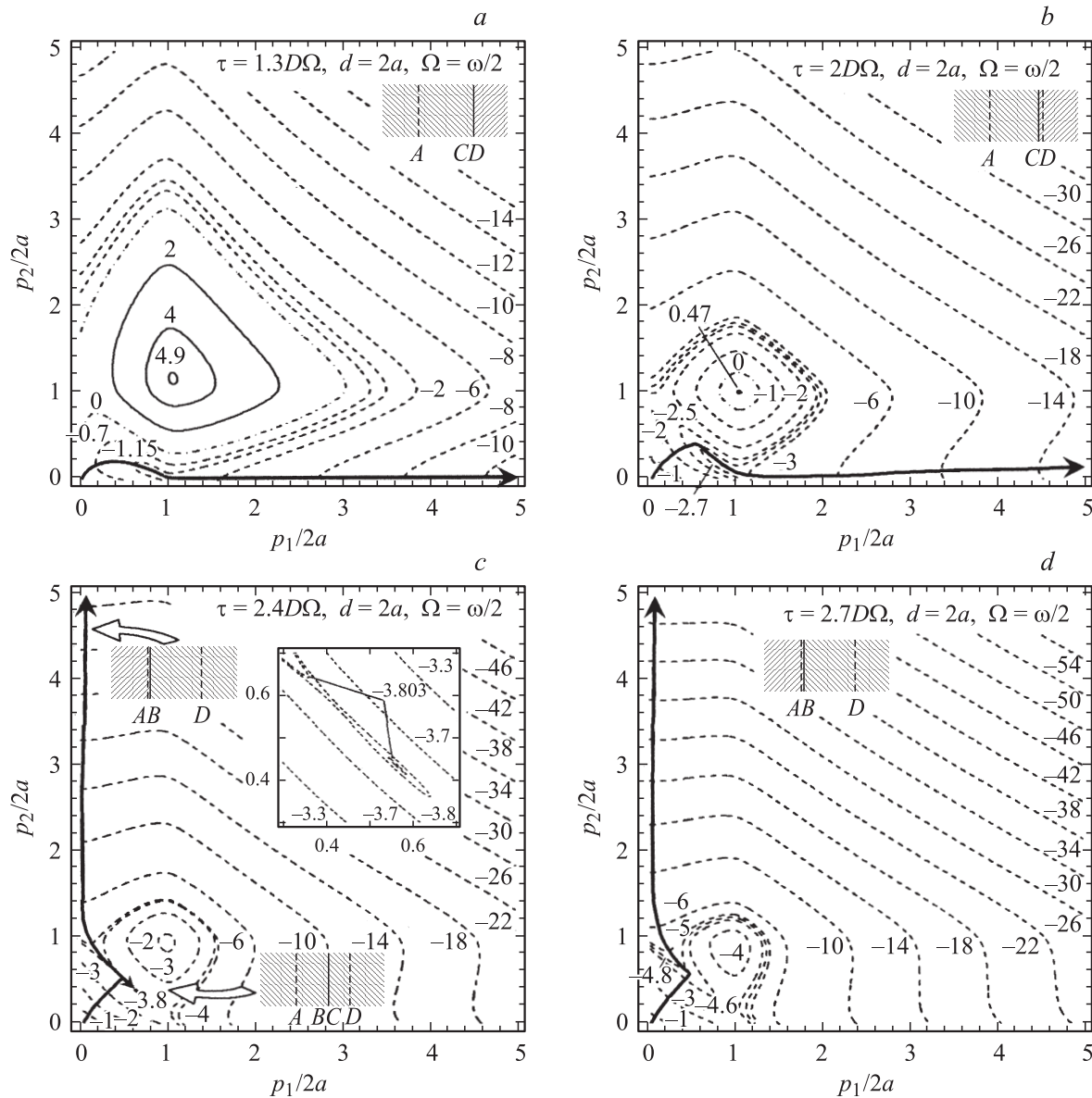
**Рис. 5.** Карты изолиний изменения энергии  $\Delta W$  в пространстве относительных смещений ( $x = p_1/2a$ ,  $y = p_2/2a$ ) мигрирующих границ с разными углами разориентировки ( $\Omega = \omega/2$ ) при различных значениях приложенного напряжения  $\tau/(D\Omega) = 0.3$  (a), 0.7 (b), 1 (c). Значения изменения энергии  $\Delta W$  даны в единицах  $2Da^2\Omega^2$ . Вставки схематично показывают равновесную конфигурацию системы трех соседних зерен, соответствующую данному уровню напряжения  $\tau$ . Жирные стрелки указывают примерную траекторию устойчивого развития системы в пространстве переменных  $x$  и  $y$ .

подвижностью. По мере роста  $\tau$  она проходит большую часть расстояния  $d$  между исходными положениями границ  $A$  и  $D$ , тогда как граница  $C$  смещается лишь на небольшое расстояние. Например, при  $\tau/(D\Omega) = 0.3$ , 0.7 и 1 относительные смещения границ соответственно составляют  $x \approx 0.05$  и  $y \approx 0.02$  (рис. 5, a),  $x \approx 0.28$  и  $y \approx 0.07$  (рис. 5, b),  $x \approx 0.75$  и  $y \approx 0.1$  (рис. 5, c). В результате происходит преимущественное разрастание зерна  $G1$  и небольшое подрастание зерна  $G3$  за счет сужающегося с ростом  $\tau$  зерна  $G2$ .

Критическое напряжение  $\tau_c$ , необходимое для начала миграции границ, можно оценить в этом случае по формуле (14). Действительно, поскольку граница  $C$  при

малых  $\tau$  практически остается на месте, а следовательно, никакого дисклинационного квадруполь не образуется, задача сводится к определению  $\tau_{c1}$  для миграции отдельной границы [45]. Например, в чистом нанокристаллическом Al с упругими модулями  $G = 27$  GPa и  $\nu = 0.31$ , межатомным расстоянием  $b \approx 0.25$  nm и размером зерна  $d = 2a = 10$  nm критическое напряжение для миграции границ наклона с углами разориентировки  $\Omega = 0.085$  ( $\approx 5^\circ$ ) и  $0.52$  ( $\approx 30^\circ$ ) составляет соответственно примерно 55.5 и 339.1 МПа.

Дальнейшее увеличение напряжения  $\tau$  нарушает устойчивость миграции границ. Так, при  $\tau = 1.3D\Omega$  граница  $B$  достигает границы  $C$  и либо аннигилирует



**Рис. 6.** Карты изолиний изменения энергии  $\Delta W$  в пространстве относительных смещений ( $x = p_1/2a$ ,  $y = p_2/2a$ ) мигрирующих границ с одинаковыми углами разориентировки ( $\Omega = \omega/2$ ) при различных значениях приложенного напряжения  $\tau/(D\Omega) = 1.3$  (a), 2 (b), 2.4 (c), 2.7 (d). Значения изменения энергии  $\Delta W$  даны в единицах  $2Da^2\Omega^2$ . Вставки схематично показывают равновесную конфигурацию системы трех соседних зерен, соответствующую данному уровню напряжения  $\tau$ . Жирные стрелки указывают примерную траекторию неустойчивого развития системы в пространстве переменных  $x$  и  $y$ . На дополнительной вставке на части c показан увеличенный фрагмент карты изолиний изменения энергии  $\Delta W$  вблизи точки бифуркации, на котором виден локальный минимум  $\Delta W/(2Da^2\Omega^2) = -3.803$  в области ( $x \approx 0.57$ ,  $y \approx 0.43$ ).

(этот случай здесь не рассматривается), либо проходит насквозь и захватывает ее. Затем они вместе мигрируют к исходному положению границы  $C$  (к линии  $D$ ), где граница  $B$  отрывается от границы  $C$ , и мигрируют в неустойчивом режиме в глубь зерна  $G3$  (рис. 6, a). Граница  $C$  занимает при этом свое исходное положение на линии  $D$ . В результате зерно  $G1$  занимает всю начальную площадь зерна  $G2$ , а зерно  $G2$  разрастается за счет зерна  $G3$ . При более высоком напряжении (здесь при  $\tau = 2D\Omega$ , рис. 6, b) все происходит так же, но

встреча границ  $B$  и  $C$  и захват границей  $B$  границы  $C$  происходят близко от центра исходного зерна  $G2$ , и границы  $C$  сначала доходит до линии  $D$ , а потом смещается в прежнем направлении к линии  $A$ . При следующем уровне напряжения  $\tau = 2.4D\Omega$  (рис. 6, c) точка встречи границ  $B$  и  $C$  становится точкой бифуркации: либо встретившиеся границы смещаются в равновесное положение ( $x \approx 0.57$ ,  $y \approx 0.43$ ), т. е. в точку локального минимума  $\Delta W/(2Da^2\Omega^2) \approx -3.803$ , показанную на вставке с увеличенным фрагментом карты,

либо граница  $C$  захватывает границу  $B$ , и они совместно мигрируют к линии  $A$ . Вблизи этой линии граница  $C$  отрывается от границы  $B$  и мигрирует в глубь зерна  $G1$ , а граница  $B$  остается почти на линии  $A$ . В итоге получается, что в первом случае зерно  $G2$  пропало, а между границами  $B$  и  $C$  произошла частичная аннигиляция, в результате которой появилась новая (разностная) устойчивая граница  $BC$  между разросшимися зернами  $G1$  и  $G3$ . Во втором случае зерно  $G3$  разрастается и занимает почти всю площадь между линиями  $A$  и  $D$ , изначально занятую зерном  $G2$ , а зерно  $G2$  неограниченно растет и занимает область зерна  $G1$ . Наконец, при еще большем уровне напряжения  $\tau = 2.7D\Omega$  (рис. 6,  $d$ ) точка встречи границ  $B$  и  $C$  уже не является точкой бифуркации. Граница  $B$  сразу захватывается границей  $C$ , и они совместно мигрируют к линии  $A$ , как и в предыдущем случае, с тем же результатом.

Таким образом, принципиальное отличие ситуации с разными углами разориентировки от ситуации с одинаковыми состоит в том, что в первом случае нарушается симметрия в эволюции системы. При разных углах разориентировки и умеренных значениях приложенного напряжения граница с меньшим углом разориентировки („слабая“ граница) оказывается значительно более подвижной, чем граница с большим углом разориентировки („сильная“ граница). Действительно, первой границе требуется меньшее внешнее напряжение  $\tau$ , чтобы преодолеть притяжение к „своим“ двойным стыкам из-за их меньшей мощности. С другой стороны, этого уровня напряжения  $\tau$  недостаточно, чтобы значительно сместить из начального положения „сильную“ границу. Слабое смещение последней сильно экранирует упругое взаимодействие „слабой“ границы с этой „сильной“ квадрупольной дисклинационной конфигурацией („сильная“ граница и „сильные“ двойные стыки). Получается, что при умеренных значениях  $\tau$  миграция „слабой“ границы в основном определяется величиной  $\tau$ . При несколько более высоких значениях  $\tau$  возникает внешне парадоксальная ситуация с захватом „слабой“ границей „сильной“ границы. На самом деле никакого парадокса здесь нет — уровня  $\tau$  уже достаточно, чтобы сместить „сильную“ границу на значительное расстояние от ее исходной позиции, но все еще недостаточно, чтобы преодолеть все возрастающие силы притяжения к „сильным“ двойным стыкам и отталкивания от „слабых“ двойных стыков. В то же время „слабая“ граница пока еще управляется в основном приложенным напряжением  $\tau$ , которого оказывается достаточно, чтобы „слабая“ граница преодолела середину исходного зерна  $G2$  — зону максимального притяжения к своим „слабым“ двойным стыкам и максимального отталкивания от противоположных „сильных“ двойных стыков. В этих условиях упругого притяжения между „сильной“ и „слабой“ границами оказывается достаточно, чтобы преодолеть действие напряжения  $\tau$  на „сильную“ границу, и „сильная“ граница захватывается „слабой“ и увлекается

за собой. Как только уровень напряжения  $\tau$  становится достаточно высоким, эта ситуация „опрокидывается“ — теперь уже „сильная“ граница преодолевает середину исходного зерна  $G2$ , встречает „слабую“ границу, и либо они вместе занимают равновесное положение вблизи от центра исходного зерна  $G2$ , либо вместе мигрируют к „слабым“ двойным стыкам. В последнем случае „сильная“ граница проходит мимо этих стыков и мигрирует дальше, а „слабая“ граница задерживается перед ними и занимает положение, близкое к исходному.

## 5. Заключение

Предложенная континуальная дисклинационная модель описывает рост зерен, стимулированный приложенным сдвиговым напряжением, как результат коллективной миграции соседних ГЗ. Она позволяет оценить критические напряжения  $\tau_c$  и  $\tau_m$ , необходимые соответственно для начала миграции границ и для их встречи. Показано, что эти критические напряжения определяются упругими свойствами материала и пропорциональны углам разориентировки границ. При этом  $\tau_c$  приблизительно обратно пропорционально размеру зерна, а  $\tau_m$  не зависит от этого размера. Количественные оценки показывают, что уровень напряжения  $\tau_c$  легко достижим при обычных режимах деформирования нанокристаллических материалов, тогда как величина  $\tau_m$  достижима при этих условиях только для малоугловых границ. Для встречи большеугловых границ требуются сверхвысокие напряжения порядка теоретической прочности на сдвиг. В рамках модели описаны такие характерные режимы миграции границ, как их устойчивая миграция навстречу друг другу (при умеренных значениях напряжения  $\tau > \tau_c$ ), захват одной границы другой и их совместная неустойчивая миграция в одном направлении (при повышенных значениях напряжения  $\tau > \tau_m$ ), отрыв одной границы от другой и их последующая миграция в разные стороны (при еще больших напряжениях). При любых режимах миграции границ происходит разрастание одних зерен за счет других. Совместная миграция обеих границ в одном направлении может рассматриваться как миграция всего зерна как целого. Встреча и частичная аннигиляция мигрирующих границ должны приводить к накоплению в растущих зернах продуктов реакции — малоугловых зерен и отдельных дислокаций, которые в свою очередь способны обеспечивать пластификацию и упрочнение материала, препятствуя чрезмерной локализации пластической деформации и последующему разрушению образца, как это наблюдалось в экспериментах [18,19,21,22,27]. В целом миграция границ и соответствующий рост зерен представляют собой эффективный механизм ротационной пластической деформации нанокристаллического материала.

## Список литературы

- [1] A.K. Mukherjee. *Mater. Sci. Eng. A* **322**, 1 (2002).
- [2] K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven, S. Suresh. *Acta Mater.* **51**, 5743 (2003).
- [3] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *Физическая механика деформируемых наноструктур. Т. 1. Нанокристаллические материалы.* Янус, СПб. (2003). 194 с.
- [4] S.C. Tjong, H. Chen. *Mater. Sci. Eng. R* **45**, 1 (2004).
- [5] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. *ФТТ* **47**, 793 (2005).
- [6] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter. *Acta Mater.* **53**, 1 (2005).
- [7] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson. *Prog. Mater. Sci.* **51**, 427 (2006).
- [8] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma. *Acta Mater.* **55**, 4041 (2007).
- [9] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural nanocrystalline materials: fundamentals and applications.* Cambridge University Press, Cambridge (2007). 378 p.
- [10] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 961 (2007).
- [11] F.A. Mohamed. *Metall. Mater. Trans. A* **38**, 340 (2007).
- [12] A.V. Sergeeva, N.A. Mara, A.K. Mukherjee. *J. Mater. Sci.* **42**, 1433 (2007).
- [13] M. Jin, A.M. Minor, E.A. Stach, J.W. Morris, jr. *Acta Mater.* **52**, 5381 (2004).
- [14] W.A. Soer, J.Th.M. De Hosson, A.M. Minor, J.W. Morris, jr., E.A. Stach. *Acta Mater.* **52**, 5783 (2004).
- [15] M. Jin, A.M. Minor, J.W. Morris, jr. *Thin Solid Films* **515**, 3202 (2007).
- [16] K. Zhang, J.R. Weertman, J.A. Eastman. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5197 (2004).
- [17] K. Zhang, J.R. Weertman, J.A. Eastman. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 061 921 (2005).
- [18] P.L. Gai, K. Zhang, J. Weertman. *Scripta Mater.* **56**, 25 (2007).
- [19] X.Z. Liao, A.R. Kilmametov, R.Z. Valiev, H. Gao, X. Li, A.K. Mukherjee, J.F. Bingert, Y.T. Zhu. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 021 909 (2006).
- [20] D. Pan, T.G. Nieh, M.W. Chen. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 161 922 (2006).
- [21] D. Pan, S. Kuwano, T. Fujita, M.W. Chen. *Nano Lett.* **7**, 2108 (2007).
- [22] D.S. Gianola, S. Van Petegem, M. Legros, S. Brandstetter, H. Van Swygenhoven, K.J. Hemker. *Acta Mater.* **54**, 2253 (2006).
- [23] D.S. Gianola, D.H. Warner, J.F. Molinari, K.J. Hemker. *Scripta Mater.* **55**, 649 (2006).
- [24] G.J. Fan, L.F. Fu, D.C. Qiao, H. Choo, P.K. Liaw, N.D. Browning. *Scripta Mater.* **54**, 2137 (2006).
- [25] G.J. Fan, L.F. Fu, H. Choo, P.K. Liaw, N.D. Browning. *Acta Mater.* **54**, 4781 (2006).
- [26] G.J. Fan, Y.D. Wang, L.F. Fu, H. Choo, P.K. Liaw, Y. Ren, N.D. Browning. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 171 914 (2006).
- [27] G.J. Fan, L.F. Fu, Y.D. Wang, Y. Ren, H. Choo, P.K. Liaw, G.Y. Wang, N.D. Browning. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 101 918 (2006).
- [28] B. Günther, A. Kumpmann, H.-D. Kunze. *Scripta Metall. Mater.* **27**, 833 (1992).
- [29] A. Kumpmann, B. Günther, H.-D. Kunze. *Mater. Sci. Eng. A* **168**, 165 (1993).
- [30] V.Y. Gertsman, R. Birringer. *Scripta Metall. Mater.* **30**, 577 (1994).
- [31] J.A. Haber, W.E. Buhro. *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 10 847 (1998).
- [32] R.Z. Valiev, E.V. Kozlov, Yu.F. Ivanov, J. Lian, A.A. Nazarov, B. Baudelet. *Acta Metall. Mater.* **42**, 2467 (1994).
- [33] X. Xu, T. Nishimura, N. Hirotsaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka. *Acta Mater.* **54**, 255 (2006).
- [34] A. Hasnaoui, H. Van Swygenhoven, P.M. Derlet. *Acta Mater.* **50**, 3927 (2002).
- [35] J. Schiøtz. *Mater. Sci. Eng. A* **375–377**, 975 (2004).
- [36] D. Farkas, A. Frøseth, H. Van Swygenhoven. *Scripta Mater.* **55**, 695 (2006).
- [37] J. Monk, D. Farkas. *Phys. Rev. B* **75**, 045 414 (2007).
- [38] F. Sansoz, V. Dupont. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 111 901 (2006).
- [39] F. Sansoz, J.F. Molinari. *Thin Solid Films* **515**, 3158 (2007).
- [40] T. Shimokawa, A. Nakatani, H. Kitagawa. *Phys. Rev. B* **71**, 224 110 (2005).
- [41] A.J. Haslam, D. Moldovan, V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, H. Gleiter. *Acta Mater.* **51**, 2097 (2003).
- [42] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **52**, 3793 (2004).
- [43] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *ФТТ* **46**, 1986 (2004).
- [44] J.C.M. Li. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 215 506 (2006).
- [45] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 251 916 (2005).
- [46] J.W. Cahn, Y. Mishin, A. Suzuki. *Acta Mater.* **54**, 4953 (2006).
- [47] L. Zhou, N. Zhou, G. Song. *Phil. Mag.* **86**, 5885 (2006).
- [48] H. Zhang, D.J. Srolovitz, J.F. Douglas, J.A. Warren. *Acta Mater.* **53**, 4527 (2007).
- [49] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. *ФТТ* **46**, 1975 (2004).
- [50] В.В. Рыбин. *Большие пластические деформации и разрушение металлов.* Металлургия, М. (1986). 224 с.
- [51] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. *Дисклинации в кристаллах.* Наука, Л. (1986). 224 с.
- [52] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, A.E. Romanov, P. Klimanek. *Phys. Stat. Sol. (a)* **193**, 35 (2002).