

## Механизм образования деформационных двойников в нанокристаллических материалах

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

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

E-mail: gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 14 сентября 2006 г.)

Предложена теоретическая модель, описывающая зарождение деформационных двойников на границах зерен в нанокристаллических материалах под действием внешнего приложенного напряжения и поля напряжений диполя стыковых или зернограничных клиновых дисклинаций. В рамках модели рассмотрены чистые нанокристаллические алюминий и медь со средним размером зерна порядка 30 nm. Исследованы условия безбарьерного зарождения двойникоующих дислокаций. Показано, что эти условия реальны для изучаемых металлов. По мере увеличения толщины двойниковой пластины наблюдаются две стадии локального упрочнения и промежуточная стадия локального течения нанокристаллического металла в масштабе одного нанозерна. При этом уровень критического напряжения на всех этих стадиях оказывается тем выше, чем меньше мощность дисклинационного диполя. Рассмотрены равновесные толщина и форма двойниковой пластины. Показано, что они хорошо согласуются с известными из литературы результатами экспериментальных наблюдений.

Работа выполнена при поддержке INTAS (грант N 03-51-3779), INTAS–AIRBUS (грант N 04-80-7339), Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-01-00211), Фонда содействия отечественной науке, Программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций. Взаимодействие нано-, микро-, мезо- и макромасштабов при деформировании и разрушении“, Программы государственной поддержки ведущих научных школ (грант Президента РФ НШ-4518.2006.1) и Комитета по науке и высшей школе Правительства Санкт-Петербурга.

PACS: 81.07.Bc, 61.72.Bb, 61.72.Lk, 61.72.Nn

Нанокристаллические материалы (НКМ) являются предметом интенсивных научных исследований, что обусловлено их необычными физическими и механическими свойствами [1–9]. Особенности пластической деформации НКМ объясняются двумя основными размерными эффектами. Во-первых, наноскопические размеры зерен существенно ограничивают действие механизмов решеточного дислокационного скольжения, обычного для крупнозернистых материалов. Во-вторых, из-за малого размера зерна значительную долю (иногда десятки процентов) объема НКМ занимают границы зерен и их тройные стыки. В результате активизируются такие механизмы пластичности, которые либо вообще не работают в обычных материалах, либо проявляются при некоторых особых условиях (при низких или высоких температурах, повышенной концентрации примесей, высоких скоростях деформации и т. д.). Одним из таких механизмов может служить наблюдаемое в эксперименте испускание границами зерен частичных дислокаций Шокли с последующим образованием дефектов упаковки и деформационных двойников в нанокристаллических алюминии [10–13] и меди [13,14]. Вообще, о формировании деформационных двойников в микрокристаллической меди при пластической деформации известно достаточно давно. Этому способствует характерное для меди сочетание низкой энергии дефекта упаковки и достаточно высокого модуля сдвига. Напротив, в микрокристаллическом алюминии деформационные двойники вообще не наблюдаются. Лишь в недавних

экспериментальных работах, посвященных исследованию пластической деформации нанокристаллического алюминия [10–13], было обнаружено деформационное двойникование. Однако полного объяснения и описания этого феномена пока не существует.

Давно установлено [15,16], что деформационные двойники в ГЦК-кристаллах образуются в результате кооперативного скольжения частичных дислокаций Шокли по ряду соседних параллельных плоскостей  $\{111\}$ . Естественно возникает вопрос об источниках таких дислокаций, способных испустить большое их количество в условиях, когда движение испущенных дислокаций ограничено наноскопическим размером зерна. Источники должны быть достаточно протяженными, чтобы обеспечить значительную толщину образуемой двойниковой прослойки, и достаточно мощными, чтобы не закрываться под действием поля напряжения первых испущенных и заторможенных границей зерна дислокаций.

В НКМ, полученных путем интенсивной пластической деформации, структура границ зерен оказывается сильно неравновесной за счет неупорядоченного поглощения решеточных дислокаций в процессе изготовления образцов [1]. Эта неравновесность проявляется, в частности, в резких изменениях угла разориентировки границы, которые находят естественное описание в терминах зернограничных дисклинаций [4,17,18]. Существование зернограничных дисклинаций в НКМ подтверждается прямыми экспериментальными наблюдениями [19]. При достаточной их мощности эти дисклинации могли бы

либо сами служить источниками двойникующих дислокаций, либо стимулировать их эмиссию из других источников.

В недавних теоретических работах [20–23] было показано, каким образом может происходить испускание отдельных частичных дислокаций из границ зерен и их тройных стыков, содержащих соответственно зернограничные и стыковые дислокации и дисклинации. В этих моделях предполагалось, что эмиссия частичных дислокаций происходит непосредственно из ядра дефекта (дислокации или дисклинации). Это плохо подходит для описания кооперативной эмиссии большой группы двойникующих дислокаций, поскольку такого рода источники истощаются сразу после испускания одной или нескольких первых дислокаций. Наши предварительные расчеты показали, что для поддержания работы таких источников необходимы очень высокие внешние напряжения, намного превышающие те, которые были возможны в экспериментах [10–13].

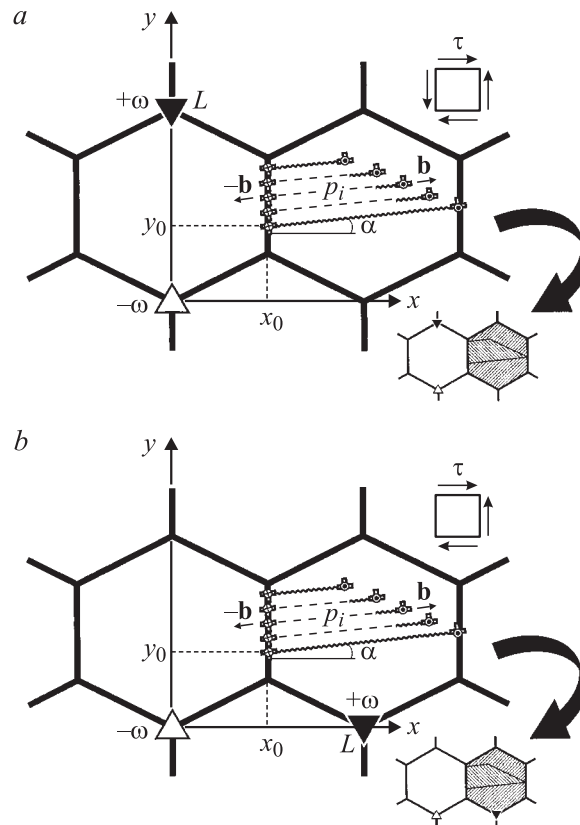
В настоящей работе предлагается значительно более общая и „гибкая“ модель гетерогенного зарождения двойникующих дислокаций на границе зерна в поле упругих напряжений двухосного диполя клиновидных зернограничных дисклинаций. Здесь источником двойникующих дислокаций становится граница зерна, а дисклинационный диполь играет роль стимулятора их зарождения.

Основная цель работы — построение теоретической модели, описывающей образование деформационных двойников в НКМ за счет последовательного испускания границей зерна двойникующих дислокаций под действием внешнего сдвигового напряжения и упругих напряжений дисклинационного диполя.

## 1. Модель образования деформационного двойника

Рассмотрим последовательную эмиссию двойникующих дислокаций в тело зерна из некоторого участка его границы (рис. 1). Считается, что в прилегающих областях НКМ действует постоянное внешнее сдвиговое напряжение  $\tau$ . Кроме того, предполагается, что этот участок границы находится в зоне действия максимального сдвигового напряжения двухосного диполя стыковых клиновидных дисклинаций мощностью  $\pm\omega$ . Из теории прямолинейных клиновидных дисклинаций [18] известно, что эта зона расположена на равном удалении от дисклинаций на расстоянии порядка половины плеча диполя от линии, соединяющей дисклинации. Далее исследуются два предельных варианта взаимной ориентации плеча диполя и испускающей дислокации участка границы: в первом случае они параллельны друг другу (рис. 1, *a*), во втором — перпендикулярны (рис. 1, *b*).

В рамках используемого далее континуального подхода процесс эмиссии двойникующей дислокации из границы зерна состоит в появлении диполя частичных дислокаций Шокли с векторами Бюргера  $\pm\mathbf{b}$ ,



**Рис. 1.** Модель зарождения деформационного двойника на границе зерна в нанокристаллическом материале под действием внешнего приложенного напряжения  $\tau$  и поля напряжений двухосного диполя стыковых клиновидных дисклинаций мощностью  $\pm\omega$ . Плечо диполя ориентировано вдоль (*a*) или поперек (*b*) границы зерна.

одна из которых (*b*-дислокация) скользит в тело зерна, а другая — ( $-b$ -дислокация) остается в границе. Эти дислокации имеют краевые (с векторами Бюргера  $\pm\mathbf{b}_1$ ) и винтовые (с векторами Бюргера  $\pm\mathbf{b}_2$ ) компоненты.

Двигаясь вдоль параллельных плоскостей скольжения, испущенные *b*-дислокации формируют позади себя полосы дефекта упаковки шириной  $p_i$  (здесь *i* — номер испущенной *b*-дислокации) с удельной поверхностной энергией  $\gamma$  (рис. 1). Ориентация плоскостей скольжения задается углом  $\alpha$  (рис. 1), а расстояние между ними определяется кристаллографией конкретного материала. Если номер *i* испущенной частичной дислокации превышает 2, то ее скольжение на расстояние  $p_i$  устраняет дефект упаковки за предыдущей (*i* – 1) частичной дислокацией до тех пор, пока эта *i*-я дислокация не опередит (*i* – 2) дислокацию. На рис. 1 эта ситуация показана для случая пяти испущенных частичных дислокаций. Жирными штриховыми линиями отмечены „залеченные“ участки с устраненным дефектом упаковки. Следствием такого залечивания становится сохранение у растущего двойника суммарной энергии дефекта упаковки, в то время как скольжение частичных дислокаций как механизм пластической релаксации обеспечивает отрицательный

вклад в изменение энергии системы. Представляется, что это является одной из основных причин кооперативного скольжения двойникующих дислокаций по соседним кристаллографическим плоскостям.

Используемый в модели отдельный диполь клиновых дисклинаций, расположенных в соседних тройных стыках границ зерен, служит источником дополнительных локальных напряжений, которые инициируют зарождение частичных дислокаций. Рассмотрение отдельного диполя стыковых дисклинаций основано на предположении, что среднее расстояние между диполями в данном НКМ существенно (в несколько раз) больше, чем среднее плечо диполя  $L$ . При этом эффективным радиусом  $R$  экранировки упругих полей диполей в самом грубом приближении может служить половина среднего расстояния между диполями. Такое приближение уже использовалось в работе [20].

В рамках предложенной модели эмиссия первой  $b$ -дислокации становится возможной при достижении внешним сдвиговым напряжением  $\tau$  некоторой критической величины  $\tau_c^{(1)}$ . При  $\tau \geq \tau_c^{(1)}$  первая  $b$ -дислокация испускается границей зерна и в зависимости от выбранных значений параметров модели либо доходит до противоположной границы зерна, либо занимает внутри зерна некоторое равновесное положение. В любом случае первая испущенная  $b$ -дислокация затрудняет эмиссию следующей частичной  $b$ -дислокации. Это приводит к необходимости повышения величины внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  до некоторого нового критического значения  $\tau_c^{(2)} > \tau_c^{(1)}$ , при котором оказывается возможным испускание второй  $b$ -дислокации. После испускания вторая  $b$ -дислокация занимает в теле зерна некоторое положение устойчивого равновесия, так как между первой и второй  $b$ -дислокациями действуют отталкивающие силы, которые, с одной стороны, не позволяют второй  $b$ -дислокации пройти дальше первой, а с другой стороны, смещают первую  $b$ -дислокацию вперед в новое положение устойчивого равновесия. При испускании последующих  $b$ -дислокаций все повторяется. Каждое новое испускание  $b$ -дислокации требует очередного повышения критического напряжения  $\tau_c^{(n)} > \tau_c^{(n-1)}$  и смещает испущенные ранее  $b$ -дислокации в новые положения устойчивого равновесия. По мере развития этого процесса часть  $b$ -дислокаций достигает противоположной границы зерна. Результатом такой последовательной эмиссии  $b$ -дислокаций и перекрытия тянущихся за ними полос дефекта упаковки становится образование достаточно толстой двойниковой пластины (см. врезки на рис. 1).

## 2. Условия зарождения первого диполя двойникующих дислокаций

Рассмотрим зарождение первого диполя частичных дислокаций с векторами Бюргерса  $\pm \mathbf{b}$  (диполя  $\pm b$ -дислокаций) на примере дефектной конфигурации, показанной на рис. 1, а. Зарождение диполя энергетически выгодно, если разность между полными энергиями

(в расчете на единицу длины дислокаций) после ( $W_2$ ) и до ( $W_1$ ) зарождения диполя станет отрицательной:  $\Delta W = W_2 - W_1 < 0$ .

Исходная дефектная конфигурация представляет собой двухосный диполь клиновых дисклинаций мощностью  $\pm \omega$  (диполь стыковых  $\pm \omega$ -дисклинаций) с плечом  $L$ . Полную энергию такой конфигурации можно записать в виде [18]

$$W_1 = E_{\text{self}}^{\Delta} = \frac{D\omega^2 L^2}{2} \left( \ln \frac{R}{L} + \frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

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

Конечная конфигурация состоит из того же диполя стыковых  $\pm \omega$ -дисклинаций и диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций. Полная энергия такой конфигурации определяется суммой

$$W_2 = E_{\text{self}}^{\Delta} + E_{\text{self}}^b + E_{\text{int}}^{\Delta-b} + E_{\gamma} + E_{\tau}, \quad (2)$$

где  $E_{\text{self}}^b$  — полная собственная энергия диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций,  $E_{\text{int}}^{\Delta-b}$  — энергия упругого взаимодействия диполя стыковых  $\pm \omega$ -дисклинаций с диполем частичных  $\pm b$ -дислокаций,  $E_{\gamma}$  — энергия дефекта упаковки и  $E_{\tau}$  — энергия взаимодействия приложенного касательного напряжения  $\tau$  с краевой компонентой  $b$ -дислокаций.

Полная собственная энергия диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций дается известным выражением [20]

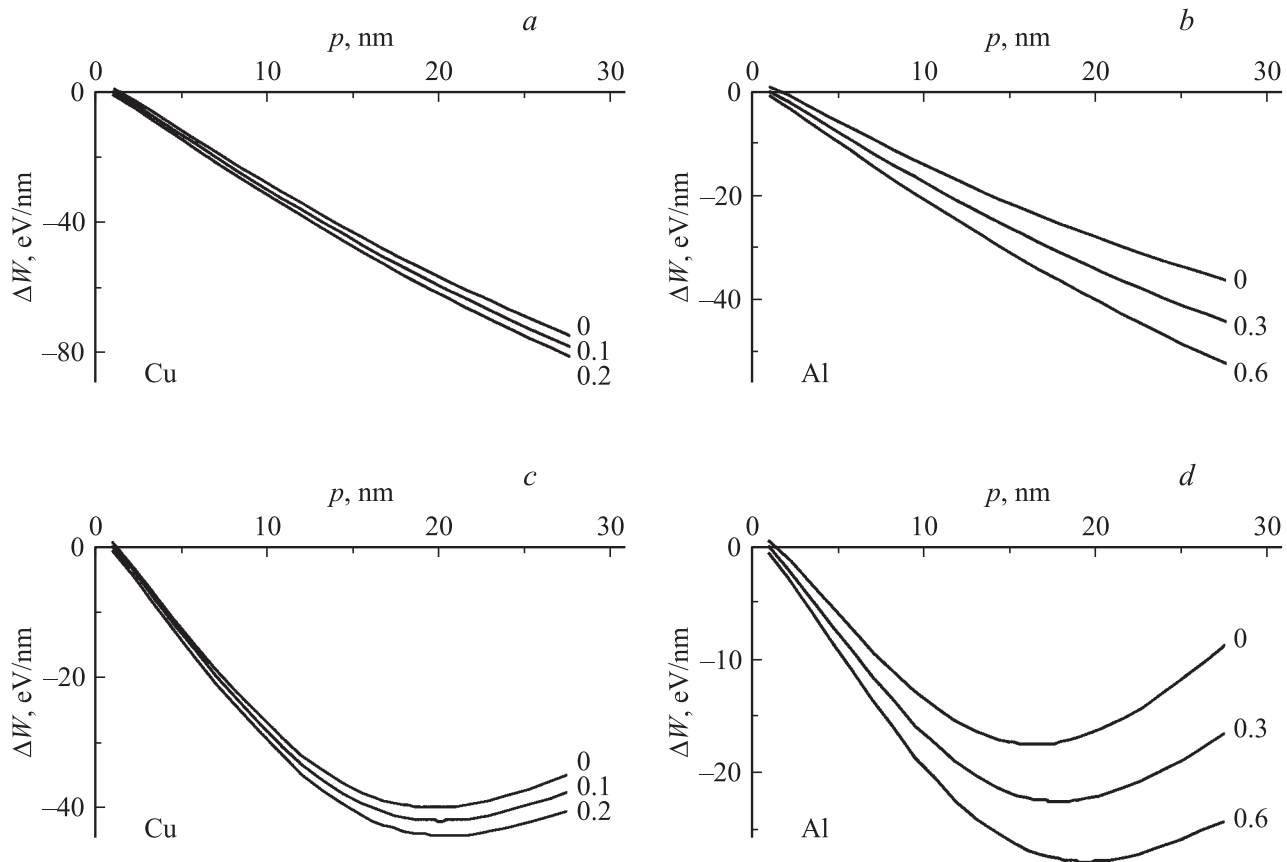
$$E_{\text{self}}^b = Db_1^2 \left( \ln \frac{p-r_{c1}}{r_{c1}} + 1 \right) + D(1-\nu)b_2^2 \left( \ln \frac{p-r_{c2}}{r_{c2}} + 1 \right), \quad (3)$$

где  $p$  — расстояние, пройденное в зерне  $b$ -дислокацией;  $r_{c1} \approx b_1$  и  $r_{c2} \approx b_2$  — соответственно радиусы обрезания полей напряжений краевой и винтовой составляющих  $b$ -дислокации.

Расчет энергии упругого взаимодействия диполя стыковых  $\pm \omega$ -дисклинаций с диполем частичных  $\pm b$ -дислокаций проводился стандартным образом — путем зарождения дислокационного диполя в поле сдвиговых напряжений дисклинационного (для примера см. [20,21]). Окончательное выражение для энергии  $E_{\text{int}}^{\Delta-b}$  имеет следующий вид:

$$E_{\text{int}}^{\Delta-b} = \frac{Db_1\omega}{2} \left( (y_0 - L \cos \alpha) \times \ln \left[ 1 + \frac{p^2 + 2px_0 - 2Lp \sin \alpha}{L^2 + x_0^2 + y_0^2 - 2Ly_0 \cos \alpha - 2Lx_0 \sin \alpha} \right] - y_0 \ln \left[ 1 + \frac{p^2 + 2px_0}{x_0^2 + y_0^2} \right] \right), \quad (4)$$

где  $x_0$  и  $y_0$  — координаты точки зарождения первого диполя  $\pm b$ -дислокаций в системе координат, показанной на рис. 1.



**Рис. 2.** Зависимость изменения энергии системы  $\Delta W$  при эмиссии двойнивающей дислокации от расстояния  $p$ , пройденного этой дислокацией в нанокристаллических Cu (*a, c*) и Al (*b, d*). Плечо дисклинационного диполя ориентировано вдоль (*a, b*) или поперек (*c, d*) границы зерна. Числа у кривых — значения внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  в единицах GPa.

Энергия дефекта упаковки  $E_\gamma$  определяется очевидным выражением

$$E_\gamma = \gamma p, \quad (5)$$

где  $\gamma$  — удельная поверхностная энергия дефекта упаковки.

Энергия  $E_\tau$  равна работе, которая совершается при перемещении частичной  $b$ -дислокации на расстояние  $p$  под действием внешнего касательного напряжения  $\tau$

$$E_\tau = -\tau b_1 p \cos 2\alpha. \quad (6)$$

С помощью формул (1)–(6) можно получить изменение полной энергии системы  $\Delta W = W_2 - W_1$  в результате зарождения диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций

$$\begin{aligned} \Delta W = & \frac{Db_1\omega}{2} \left( (y_0 - L \cos \alpha) \right. \\ & \times \ln \left[ 1 + \frac{p^2 + 2px_0 - 2Lp \sin \alpha}{L^2 + x_0^2 + y_0^2 - 2Ly_0 \cos \alpha - 2Lx_0 \sin \alpha} \right] \\ & - y_0 \ln \left[ 1 + \frac{p^2 + 2px_0}{x_0^2 + y_0^2} \right] \Big) + Db_1^2 \left( \ln \frac{p - r_{c1}}{r_{c1}} + 1 \right) \\ & + D(1 - \nu)b_2^2 \left( \ln \frac{p - r_{c2}}{r_{c2}} + 1 \right) + \gamma p - \tau b_1 p \cos 2\alpha. \quad (7) \end{aligned}$$

Рассмотрим, как меняется разность энергий  $\Delta W$  по мере продвижения частичной  $b$ -дислокации в глубь зерна на расстояние  $p$ . Расчеты проводились на примере нанокристаллических Cu и Al для следующих значений параметров модели [16,24]. Cu:  $G = 44$  GPa,  $\nu = 0.38$ ,  $\gamma = 45$  мДж · м<sup>-2</sup>,  $b_1 \approx 0.128$  нм и  $b_2 \approx 0.02$  нм; Al:  $G = 27$  GPa,  $\nu = 0.31$ ,  $\gamma = 120$  мДж · м<sup>-2</sup>,  $b_1 \approx 0.143$  нм и  $b_2 \approx 0.022$  нм. Мощность  $\omega$  дисклинационного диполя и длина его плеча были взяты соответственно равными  $\omega = 0.5$  и  $L = 30$  нм. В качестве места зарождения первого диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций была выбрана точка с координатами  $x_0 = y_0 = L/2$  при  $\alpha = 0^\circ$ . Именно в этой точке на частичную  $b$ -дислокацию действует максимальное отталкивающее сдвиговое напряжение со стороны дисклинационного диполя, а в плоскости скольжения, ориентированной под углом  $\alpha = 0^\circ$ , внешнее сдвиговое напряжение  $\tau$  достигает наибольшей величины.

Результаты численного расчета зависимости  $\Delta W(p)$  для первой (рис. 1, *a*) и второй (рис. 1, *b*) дефектных конфигураций при различных значениях  $\tau$  показаны соответственно на рис. 2, *a, b* и *c, d*. Видно, что как для Cu (рис. 2, *a, c*), так и для Al (рис. 2, *b, d*)

существует некоторое критическое значение напряжения  $\tau_c$ , при котором зарождение диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций становится возможным (что соответствует неравенству  $\Delta W < 0$ ). Величину этого критического напряжения можно определить из условия  $\Delta W(p = p^*) = 0$ , где  $p^* = 1 \text{ nm}$  — такое наименьшее расстояние, пройденное первой  $b$ -дислокацией от границы зерна, при котором данная континуальная модель уже оказывается достаточно корректной. Кроме того, это расстояние соответствует обычной толщине неравновесных границ зерен в НКМ, полученных интенсивной пластической деформацией, так что рассмотрение зависимости  $\Delta W(p)$  при  $p < p^*$  просто лишено всякого смысла. Как видно из рис. 2, при  $p = p^*$  функция  $\Delta W(p)$  достигает наибольших значений, так что выполнение равенства  $\Delta W(p = p^*) = 0$  гарантирует, что  $\Delta W < 0$  при  $p > p^*$ . В случае нанокристаллических Cu и Al это уравнение соответственно дает  $\tau_c \approx 100$  и  $300 \text{ МПа}$ .

Рассмотрим, как влияет ориентация дисклинационного диполя на вид кривых  $\Delta W(p)$ . Во-первых, обе выбранные для анализа ориентации диполя (рис. 1) дают одинаковые критические напряжения  $\tau_c$ , поскольку в обоих случаях первая  $b$ -дислокация испускается из точки, где сдвиговое напряжение дисклинационного диполя максимально и одинаково для обеих его ориентаций. Поэтому начальные участки кривых  $\Delta W(p)$  на рис. 2, *a(b)* и 2, *c(d)* практически совпадают. Во-вторых, последующие участки этих кривых существенно отличаются: при первой ориентации диполя (рис. 1, *a*) функция  $\Delta W(p)$  монотонно убывает (рис. 2, *a, b*), при второй (рис. 1, *b*) — сначала убывает, достигает минимума и затем возрастает (рис. 2, *c, d*). Это означает, что в первом случае частичной  $b$ -дислокации энергетически выгодно беспрепятственно пересечь зерно и дойти до противоположной границы, а во втором — перейти в положение устойчивого равновесия внутри зерна. Это отличие объясняется особенностями распределения поля сдвиговых напряжений дисклинационного диполя [18,25]. В первом случае (рис. 1, *a*) испущенная  $b$ -дислокация на протяжении всего своего пути (при  $\alpha = 0^\circ$ ) остается в зоне действия медленно убывающего положительного сдвигового напряжения диполя, во втором (рис. 1, *b*) — в зоне действия быстро убывающего знакопеременного (сначала положительного, а затем отрицательного) сдвигового напряжения диполя. В последнем случае положение устойчивого равновесия оказывается вблизи линии нулевого уровня этого напряжения (точное положение равновесия определяется балансом действующих на дислокацию сил, обусловленных внешним напряжением  $\tau$ , напряжением дисклинационного диполя и уширением полосы дефекта упаковки; с ростом  $\tau$  положение равновесия смещается к противоположной границе зерна).

### 3. Условия образования деформационного двойника

В рамках принятой модели образование деформационного двойника происходит путем последовательной эмиссии двойникующих дислокаций из границы зерна (рис. 1). Обобщая подход, рассмотренный в предыдущем разделе, на случай многих двойникующих дислокаций, определим условия, необходимые для эмиссии любой из этих дислокаций. Для этого исследуем переход дефектной системы из  $(n-1)$ -го состояния с полной энергией  $W_{n-1}$ , соответствующего наличию  $(n-1)$  диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций, в  $n$ -е состояние с полной энергией  $W_n$ , соответствующее зарождению  $n$ -го дислокационного диполя. Такая трансформация дефектной системы энергетически выгодна при выполнении условия  $\Delta W_n = W_n - W_{n-1} < 0$ . Выражение  $\Delta W_n = 0$  позволяет найти критическое напряжение  $\tau_c^{(n)}$  перехода дефектной системы из  $(n-1)$ -го состояния в  $n$ -ое. Расчет энергетических характеристик системы проведем на примере дефектной конфигурации, показанной на рис. 1, *a*. В случае дефектной конфигурации, изображенной на рис. 1, *b*, расчеты выполняются аналогично, с учетом иной ориентации дисклинационного диполя.

В  $(n-1)$ -ом состоянии полная энергия дефектной системы определяется выражением

$$W_{n-1} = E_{\text{self}\Sigma}^{\Delta} + E_{\text{self}\Sigma}^{b(n-1)} + E_{\text{int}\Sigma}^{\Delta-b(n-1)} + E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n-1)} + E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)} + E_{\tau\Sigma}^{(n-1)}, \quad (8)$$

где  $E_{\text{self}\Sigma}^{b(n-1)}$  — суммарная собственная энергия  $n-1$  диполей частичных  $\pm b$ -дислокаций,  $E_{\text{int}\Sigma}^{\Delta-b(n-1)}$  — суммарная энергия упругого взаимодействия между диполем стыковых  $\pm\omega$ -дисклинаций и всеми  $(n-1)$  диполями частичных  $\pm b$ -дислокаций,  $E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n-1)}$  — суммарная энергия упругого взаимодействия между всеми  $(n-1)$  диполями частичных  $\pm b$ -дислокаций,  $E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)}$  — суммарная энергия всех сохранившихся участков дефектов упаковки,  $E_{\tau\Sigma}^{(n-1)}$  — суммарная энергия взаимодействия внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  со всеми  $(n-1)$  частичными  $b$ -дислокациями.

Полная собственная энергия всех  $(n-1)$  диполей частичных  $\pm b$ -дислокаций представляет собой сумму их собственных энергий, определяемых формулой (3),

$$E_{\text{self}\Sigma}^{b(n-1)} = D \sum_{i=1}^{n-1} \left\{ b_1^2 \left( \ln \frac{p_i - r_{c1}}{r_{c1}} + 1 \right) + (1 - \nu) b_2^2 \left( \ln \frac{p_i - r_{c2}}{r_{c2}} + 1 \right) \right\}, \quad (9)$$

где  $p_i$  — расстояние, пройденное  $i$ -ой частичной  $b$ -дислокацией.

Энергия упругого взаимодействия между диполем стыковых  $\pm\omega$ -дислокаций и всеми  $(n-1)$  диполями частичных  $\pm b$ -дислокаций дается аналогичной суммой

$$E_{\text{int}\Sigma}^{\Delta-b(n-1)} = \frac{Db_1\omega}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \left( (y_i - L \cos \alpha) \times \ln \left[ 1 + \frac{p_i^2 + 2p_i x_0 - 2Lp_i \sin \alpha}{L^2 + x_0^2 + y_i^2 - 2Ly_i \cos \alpha - 2Lx_0 \sin \alpha} \right] - y_i \ln \left[ 1 + \frac{p_i^2 + 2p_i x_0}{x_0^2 + y_i^2} \right] \right), \quad (10)$$

где  $y_i$  — ордината точки зарождения  $i$ -го диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций в системе координат, показанной на рис. 1,  $a$ .

Энергия упругого взаимодействия между  $i$ -м и  $j$ -м диполями частичных  $\pm b$ -дислокаций рассчитывается путем зарождения  $i$ -го диполя в поле сдвиговых напряжений  $j$ -го диполя (см., например, [22]). Энергия  $E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n-1)}$  представляет собой суммарную энергию всех таких парных взаимодействий между дислокационными диполями и может быть записана в виде двойной суммы по индексам  $i$  и  $j$

$$E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n-1)} = \frac{Db^2}{2} \times \sum_{i=1}^{n-2} \sum_{j=i+1}^{n-1} \left\{ 2y_{ij}^2 \left( \frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij} - 2p_i p_j}{(p_j^2 + x_{ij}^2 + y_{ij}^2 + 2p_j x_{ij})(p_j^2 + p_{ij}^2 + y_{ij}^2 + 2p_j x_{ij} - 2p_i x_{ij} - 2p_i p_j)} \right) - \frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij}}{(x_{ij}^2 + y_{ij}^2)(p_j^2 + x_{ij}^2 + y_{ij}^2 - 2p_i x_{ij})} \right\} + \ln \left[ 1 + \frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij}}{x_{ij}^2 + y_{ij}^2} \right] - \ln \left[ 1 + \frac{p_i^2 - 2p_i x_{ij} - 2p_i p_j}{p_j^2 + x_{ij}^2 + y_{ij}^2 + 2p_j x_{ij}} \right], \quad (11)$$

где  $x_{ij} = (y_j - y_i) \sin \alpha$ ,  $y_{ij} = (y_j - y_i) \cos \alpha$ .

Суммарная энергия всех (сохранившихся участков) полос дефекта упаковки очевидно равна

$$E_{\gamma\Sigma}^{(n-1)} = \begin{cases} \gamma p_1, & n-1 = 1 \\ \gamma(p_1 + p_2), & n-1 \geq 2 \end{cases}. \quad (12)$$

Суммарная энергия взаимодействия внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  со всеми  $(n-1)$  частичными  $b$ -дислокациями определяется формулой

$$E_{\tau\Sigma}^{(n-1)} = -b_1 \tau \cos 2\alpha \sum_{i=1}^{n-1} p_i. \quad (13)$$

Полная энергия системы в  $n$ -м состоянии состоит из следующих слагаемых:

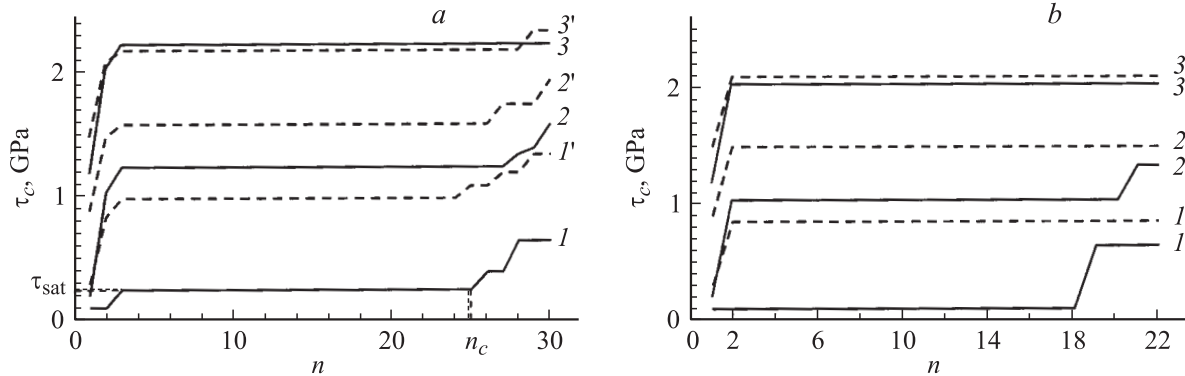
$$W_n = E_{\text{self}}^{\Delta} + E_{\text{self}\Sigma}^{b(n)} + E_{\text{int}\Sigma}^{\Delta-b(n)} + E_{\text{int}\Sigma}^{b-b(n)} + E_{\gamma\Sigma}^{(n)} + E_{\tau\Sigma}^{(n)}. \quad (14)$$

Расчет энергий, входящих в формулу (15), полностью аналогичен расчету соответствующих энергий в формуле (8) с учетом замены  $n$  на  $n-1$  и определением новых положений устойчивого равновесия  $p_i$  ранее испущенных частичных  $b$ -дислокаций.

Таким образом, определены все слагаемые выражений для энергий  $W_{n-1}$  и  $W_n$ , составляющих разность  $\Delta W_n = W_n - W_{n-1}$ .

Положения  $\tilde{p}_i$  устойчивого равновесия испущенных частичных  $b$ -дислокаций соответствуют точкам минимума на зависимостях  $\Delta W_n(p_i)$  и могут быть найдены из уравнения  $\partial \Delta W_n / \partial p_i = 0$ . Для определения  $\tilde{p}_i$  использовался следующий алгоритм численных расчетов. Положение  $\tilde{p}_1$  устойчивого равновесия первой испущенной  $b$ -дислокации находили из уравнения  $\partial \Delta W_1 / \partial p_1 = 0$ , где  $\Delta W_1 = \Delta W$  определяется выражением (7). Фиксируя это значение  $\tilde{p}_1$ , мы рассчитывали положение  $\tilde{p}_2$  устойчивого равновесия второй испущенной  $b$ -дислокации как решение уравнения  $\partial \Delta W_2 / \partial p_2 |_{p_1=\tilde{p}_1} = 0$ , где  $\Delta W_2 = W_2 - W_1$ . Энергии  $W_1$  и  $W_2$  определяются соответственно выражениями (7) и (14) при  $n=2$ . С использованием найденного таким образом значения  $\tilde{p}_2$  из уравнения  $\partial \Delta W_2 / \partial p_1 |_{p_2=\tilde{p}_2} = 0$  находили новое, скорректированное значение для  $\tilde{p}_1$ . В свою очередь это скорректированное значение для  $\tilde{p}_1$  использовалось для коррекции значения  $\tilde{p}_2$ , которое определялось как решение уравнения  $\partial \Delta W_2 / \partial p_2 |_{p_1=\tilde{p}_1} = 0$ . Затем новое, скорректированное значение для  $\tilde{p}_2$  использовалось для новой коррекции значения  $\tilde{p}_1$  на следующей итерации и т.д. Такая итерационная процедура коррекции выполнялась до тех пор, пока значения  $\tilde{p}_1$  и  $\tilde{p}_2$  не сходились к некоторым постоянным величинам. Эти величины считались установленными положениями устойчивого равновесия первой и второй двойникующих дислокаций (для  $n=2$ ). Аналогичные численные процедуры выполнялись и в общем случае для произвольного числа  $n$ . По этому алгоритму были рассчитаны положения  $\tilde{p}_i$  (где  $i=1, \dots, n$ ) устойчивого равновесия для  $n$  двойникующих дислокаций.

Уравнение  $\Delta W_n = 0$  позволяет определить критическое сдвиговое напряжение  $\tau_c^{(n)}$  зарождения  $n$ -го диполя частичных  $\pm b$ -дислокаций. Из этого уравнения с помощью описанного алгоритма определения положений устойчивого равновесия испущенных частичных  $b$ -дислокаций были найдены зависимости критического сдвигового напряжения  $\tau_c$  от числа частичных дислокаций  $n$  при различных значениях мощности  $\omega$  диполя стыковых  $\pm\omega$ -дислокаций. Расчеты проводились на примере нанокристаллических Cu и Al при тех же значениях параметров модели, которые использовались при построении кривых на рис. 2. Результаты показаны



**Рис. 3.** Зависимость критического напряжения  $\tau_c$  эмиссии двойнивающей дислокации от ее порядкового номера  $n$  в нанокристаллических Cu (кривые 1–3) и Al (кривые 1'–3') при различных значениях мощности дисклинационного диполя:  $\omega = 0.5$  (кривые 1, 1'), 0.4 (кривые 2, 2') и 0.3 (кривые 3, 3'). Плечо диполя ориентировано вдоль (a) или поперек (b) границы зерна.

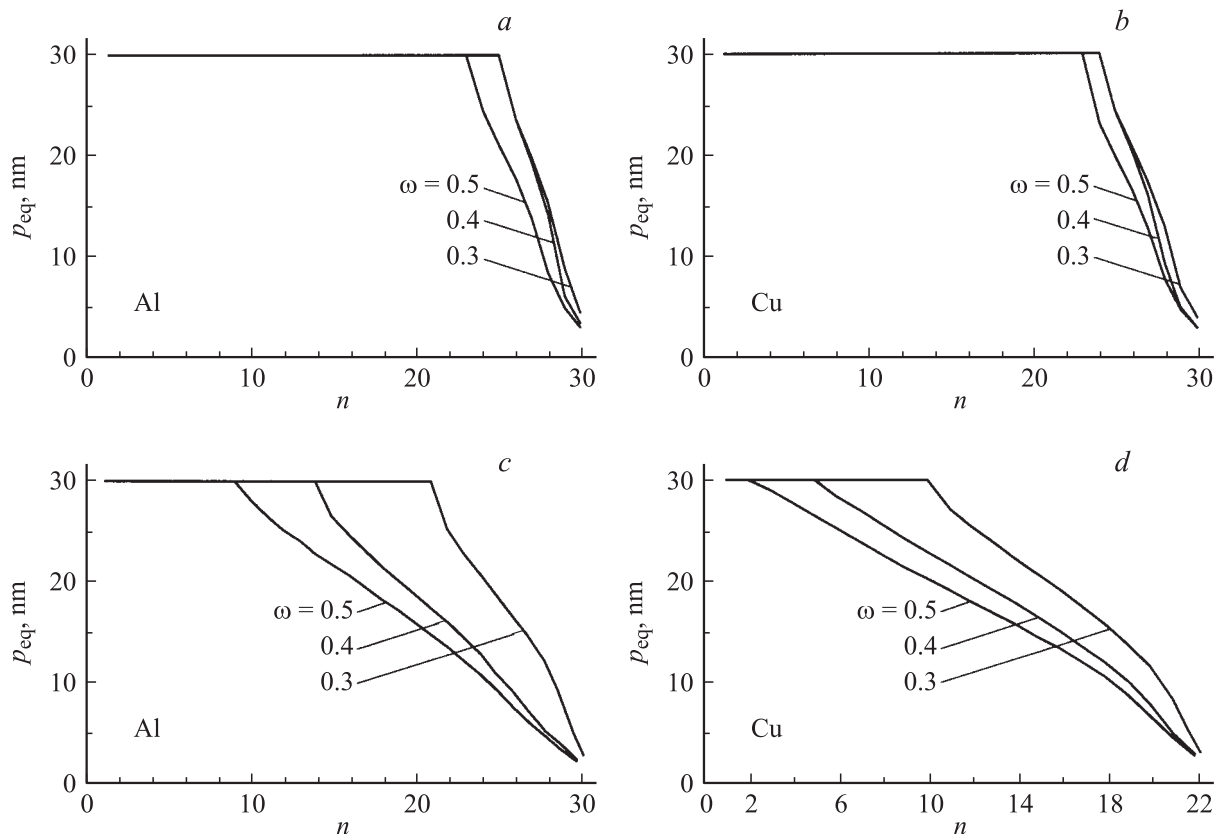
на рис. 3, a (первая дефектная конфигурация) и 3, b (вторая дефектная конфигурация) для Cu (кривые 1–3) и Al (кривые 1'–3') при  $\omega = 0.5$  (кривые 1, 1'), 0.4 (кривые 2, 2') и 0.3 (кривые 3, 3'). Видно, что во всех случаях на начальной стадии образования двойника наблюдается рост критического напряжения  $\tau_c$  (первая стадия локального упрочнения). Достигнув некоторого уровня  $\tau_{\text{sat}}$ , кривая  $\tau_c(n)$  выходит на насыщение и до определенного момента не зависит от числа  $n$  испущенных частичных  $b$ -дислокаций (стадия локального течения за счет утолщения двойниковой пластины). Наконец, для испускания частичной дислокации с номером, превышающим некоторое критическое число  $n_c$ , снова требуется повышение критического напряжения (вторая стадия локального упрочнения). Из представленных на рис. 3 зависимостей также видно, что как для Cu так и для Al незначительное снижение мощности  $\omega$  дисклинационного диполя ведет к очень существенному росту критического напряжения.

На рис. 4 приведены результаты численного расчета зависимостей положений устойчивого равновесия  $p_{\text{eq}}$  от номера  $n$  испущенных частичных  $b$ -дислокаций для первой (рис. 4, a, b) и второй (рис. 4, c, d) дефектных конфигураций при различных значениях мощности  $\omega$  дисклинационного поля. По сути эти зависимости показывают конфигурацию фронта деформационного двойника. В обоих случаях двойниковая пластина у своего основания (у той границы зерна, на которой зарождается двойник) имеет конечную толщину, определяемую критическим числом  $n_c$ . При этом в первом случае (рис. 4, a, b) большинство частичных дислокаций, образующих двойник, пересекает зерно, что придает продольному сечению двойниковой пластины приблизительно прямоугольную форму. Во втором случае частичные дислокации более равномерно распределяются в зерне, что приводит к явной трапециевидной и даже к клиновидной форме двойника (рис. 4, c, d). Тот факт, что уменьшение мощности  $\omega$  дисклинационного диполя приводит к утолщению двойниковой пластины,

объясняется просто: при этом резко растет критическое напряжение  $\tau_c \approx \tau_{\text{sat}}$  (рис. 3), которое нужно приложить, чтобы обеспечить устойчивое утолщение двойниковой пластины за счет эмиссии двойнивающих дислокаций. Естественно, что при таком высоком постоянном напряжении эти дислокации проходят по зерну дальше, чем при низких напряжениях, соответствующих большему  $\omega$ . Соответственно и двойниковая пластина становится при этом относительно толще. Этот эффект сильнее выражен (рис. 4, c, d) в случае второй ориентации дисклинационного диполя (рис. 1, b), когда его упругое поле быстро убывает и меняет знак вдоль линий скольжения двойнивающих дислокаций.

Таким образом, в случае зарождения деформационного двойника вблизи дисклинационного диполя относительно малой мощности нужно приложить достаточно высокое внешнее напряжение, чтобы обеспечить формирование двойниковой пластины, причем эта пластина будет относительно более толстой и по форме ближе к прямоугольной. Если же зарождение двойника происходит вблизи дисклинационного диполя относительно большой мощности, то оно будет развиваться при относительно малых внешних напряжениях, и двойниковая пластина будет относительно тонкой и по форме ближе к клиновидной. Влияние мощности дисклинационного диполя на толщину и форму двойниковой пластины слабо проявляется в случае первой ориентации диполя (рис. 1, a) и сильно — в случае второй (рис. 1, b).

Сделаем численные оценки толщины двойниковой пластины для первой ориентации дисклинационного диполя, когда его мощность слабо влияет на геометрию пластины. В этом случае в нанокристаллических Al и Cu толщина двойниковой пластины определяется приблизительно равными критическими числами испущенных двойнивающих дислокаций:  $n_c \approx 24–30$  (рис. 4, a, b). Взяв расстояния  $\delta$  между соседними атомными плоскостями  $\{111\}$  равными  $\delta_{\text{Al}} \approx 0.234$  nm и  $\delta_{\text{Cu}} \approx 0.207$  nm, получаем оценки толщины двойниковой



**Рис. 4.** Зависимость равновесного положения  $p_{eq}$  двойнивающей дислокации от ее порядкового номера  $n$  в нанокристаллических Al (*a, c*) и Cu (*b, d*) при различных значениях мощности дисклинационного диполя:  $\omega = 0.3, 0.4$  и  $0.5$ . Плечо диполя ориентировано вдоль (*a, b*) или поперек (*c, d*) границы зерна.

пластины:  $\approx 5.6\text{--}7\text{ nm}$  для Al и  $\approx 5\text{--}6\text{ nm}$  для Cu. Нижние пределы соответствуют наибольшим значениям мощности дисклинационного диполя  $\omega$  и наименьшим значениям критического внешнего напряжения  $\tau_c$ , и наоборот, верхние пределы — наименьшим  $\omega$  и наибольшим  $\tau_c$ . Полученные оценки толщины двойниковой пластины хорошо согласуются с изображениями деформационных двойников, наблюдавшимися в нанокристаллических Al и Cu с помощью просвечивающей электронной микроскопии прямого разрешения (HRTEM) [10,12,14].

Подведем основные итоги работы. Предложена теоретическая модель, описывающая зарождение деформационных двойников на границе зерен в НКМ под действием внешнего приложенного напряжения и поля напряжений диполя стыковых или зернограничных клиновых дисклинаций. При построении модели использованы три основных допущения: (1) двойниковая пластина образуется путем перекрытия полос дефекта упаковки, которые тянутся за двойнивающими дислокациями; (2) двойнивающие дислокации последовательно испускаются участком неравновесной границы зерна; (3) этот участок расположен в зоне действия максимальных сдвиговых напряжений соседнего двухосного диполя клиновых дисклинаций. В рамках такой модели

рассмотрены чистые нанокристаллические алюминий и медь со средним размером зерна порядка 30 nm. Для двух характерных ориентаций плеча дислокационного диполя определены такие интервалы изменения основных параметров модели (мощности дисклинационного диполя  $\omega$  и уровня внешнего напряжения  $\tau$ ), в которых образование деформационных двойников оказывается энергетически выгодным. Показано, что, если  $\omega$  и  $\tau$  достаточно велики, для зарождения деформационного двойника не требуется преодоления энергетического барьера. При этом значения  $\omega$  и  $\tau$  остаются в рамках величин, типичных для НКМ. Например, критическое внешнее напряжение, необходимое для зарождения первой двойнивающей дислокации, составляет (при  $\omega = 0.5$ ) примерно 0.1 GPa для Cu и 0.3 GPa для Al. По мере роста толщины двойниковой пластины критическое напряжение эмиссии новых двойнивающих дислокаций сначала растет, затем достигает насыщения, а потом снова растет. Таким образом, наблюдаются две стадии локального упрочнения и промежуточная стадия локального течения нанокристаллического металла в масштабе одного нанозерна. Уровень критического напряжения  $\tau_c$  на всех этих стадиях очень сильно зависит от мощности дисклинационного диполя  $\omega$ : уменьшение  $\omega$  приводит к резкому росту уровня  $\tau_c$ . Изучение зависимости рав-



новесного положения двойнивающей дислокации от ее порядкового номера позволило получить форму фронта двойниковой пластины. В зависимости от ориентации плеча дисклинационного диполя продольное сечение этой пластины близко по форме к прямоугольнику или к затупленному клину, что хорошо согласуется с известными из других работ результатами экспериментальных наблюдений. Сделанные теоретические оценки толщины двойниковой пластины также соответствуют эксперименту.

## Список литературы

- [1] Р.З. Валиев, И.В. Александров. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. Логос, М. (2000). 272 с.
- [2] А.И. Гусев, А.А. Ремпель. Нанокристаллические материалы. Физматлит, М. (2000). 224 с.
- [3] K.A. Padmanabhan. Mater. Sci. Eng. A **304-306**, 200 (2000).
- [4] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Физическая механика деформируемых наноструктур. Т. 1. Нанокристаллические материалы. Янус, СПб. (2003). 194 с.
- [5] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. ФТТ **47**, 793 (2005).
- [6] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев. ФТТ **47**, 816 (2005).
- [7] B.Q. Han, E. Lavernia, F.A. Mohamed. Rev. Adv. Mater. Sci. **9**, 1 (2005).
- [8] I.A. Ovid'ko. Rev. Adv. Mater. Sci. **10**, 89 (2005).
- [9] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter. Acta Mater. **53**, 1 (2005).
- [10] M.W. Chen, E. Ma, K.J. Hemker, H.W. Sheng, Y.M. Wang, X.M. Cheng. Science **300**, 1275 (2003).
- [11] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, S.G. Srinivasan, M.I. Baskes, D.W. He, Y.T. Zhu. Appl. Phys. Lett. **83**, 632 (2003).
- [12] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu. Appl. Phys. Lett. **83**, 5062 (2003).
- [13] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, E.J. Lavernia. Appl. Phys. Lett. **98**, 0343191 (2005).
- [14] X.Z. Liao, F. Zhou, S.G. Srinivasan, Y.T. Zhu, R.Z. Valiev, D.V. Gunderov. Appl. Phys. Lett. **84**, 592 (2004).
- [15] G.B. Olson, M. Cohen. Metall. Trans. A **7**, 1897 (1976).
- [16] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [17] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М. (1986). 242 с.
- [18] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Наука, Л. (1986). 224 с.
- [19] M. Murayama, J.M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki. Science **295**, 2433 (2002).
- [20] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. ФТТ **46**, 1975 (2004).
- [21] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Acta Mater. **52**, 3793 (2004).
- [22] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. J. Phys. D: Appl. Phys. **38**, 3921 (2005).
- [23] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Phys. Rev. B **73**, 064 102 (2006).
- [24] R.J. Asaro, J. Suresh. Acta Mater. **53**, 3369 (2003).
- [25] К.Н. Микаелян, М. Seefeldt, М.Ю. Гуткин, Р. Klimanek, А.Е. Романов. ФТТ **45**, 2002 (2003).