

# Испускание дислокаций порами в нанокристаллических металлах

© С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько

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

E-mail: ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 20 сентября 2006 г.)

Предложена теоретическая модель испускания решеточных и зернограничных дислокаций из пор в нанокристаллических металлах при механическом нагружении. В рамках модели испускание дислокации осуществляется путем наноскопического идеального сдвига. При этом дислокация зарождается на конечном расстоянии от поры, а модуль ее вектора Бюргерса непрерывно увеличивается от нуля до модуля вектора Бюргерса решеточной или зернограничной дислокации. Определены уровень внешнего напряжения и критическое расстояние между порой и дислокацией, при которых испускание дислокации путем наноскопического идеального сдвига в нанокристаллических Ni, Al и Cu является энергетически выгодным и безбарьерным процессом.

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), Программы государственной поддержки ведущих научных школ (грант Президента РФ НШ-4518.2006.1), Программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций. Взаимодействие нано-, микро-, мезо- и макромасштабов при деформировании и разрушении“, Комитета по науке и высшей школе правительства Санкт-Петербурга (грант для молодых кандидатов наук PD06-1.10-144) и Совета по грантам Президента РФ (грант МК-2902.2005.1).

PACS: 61.72.Lk, 62.25.+g

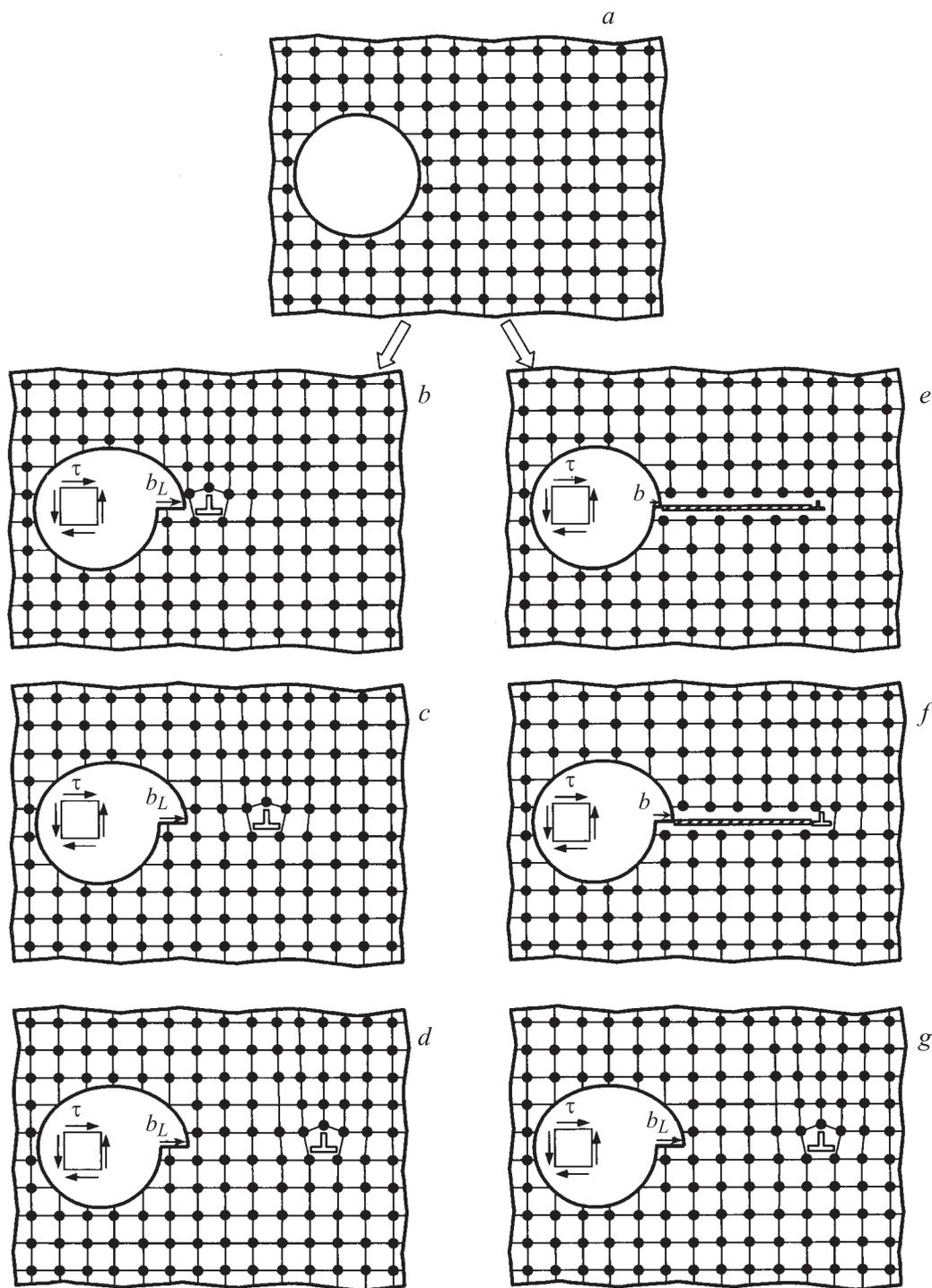
Нанокристаллические металлы (НКМ) — металлы с размером зерна менее 100 nm — характеризуются физическими и механическими свойствами, которые существенно отличаются от подобных свойств металлов в обычном поликристаллическом состоянии (например, [1–10]). В частности, НКМ обычно характеризуются очень высокой прочностью. Некоторые НКМ и сплавы обладают также достаточно высокой пластичностью [5–8] или даже сверхпластичностью [9,10], достижимой при относительно низких температурах и высоких скоростях деформации. Пластичность, являющаяся чрезвычайно важной характеристикой НКМ, существенным образом зависит от поведения пор в таких металлах при механической нагрузке. Растягивающие напряжения в кристаллах стимулируют рост пор, скорость которого обычно контролируется диффузионным массопереносом особенно в случае высоких температур [11].

Рост пор возможен и за счет испускания ими дислокаций [12]. Однако, согласно расчетам [12,13], обычный механизм испускания дислокаций порами (посредством зарождения дислокаций на свободной поверхности поры и ее последующего скольжения в кристалле; см. рис. 1, *a–d*) для многих материалов при квазистатическом нагружении требует преодоления значительного энергетического барьера. Поэтому действие такого механизма является эффективным только в кристаллах при высокоскоростном (ударном) нагружении, при котором действуют предельно высокие касательные напряжения [12]. Вместе с тем недавно был предложен новый механизм зарождения дислокаций в НКМ, Гам-металлах (Gum Metal) и нанокомпозитах, который основывается на представлениях о наноскопическом идеальном сдвиге,

реализуемом при высоких касательных напряжениях [14–16]. Такие представления применимы также при описании процесса испускания дислокаций порами в деформируемых твердых телах. Основная цель настоящей работы — теоретическое описание нового механизма испускания решеточных и зернограничных дислокаций порами в НКМ, а именно испускания посредством наноскопического идеального сдвига.

## 1. Испускание дислокаций порами в металлах посредством наноскопического идеального сдвига. Модель

Действие стандартного и нового механизмов испускания дислокаций порами иллюстрируется на рис. 1. Рассмотрим пору в деформируемом ГЦК-металле (металле с гранцентрированной кубической решеткой) (рис. 1, *a*). Серия рис. 1, *b–d* демонстрирует стандартный механизм эмиссии решеточной дислокации из поры под действием внешнего касательного напряжения  $\tau$ . Стандартный механизм реализуется посредством зарождения дислокаций на свободной поверхности поры и ее последующего скольжения в кристалле (рис. 1, *a–d*). Расчеты, проведенные в работах [12,13], показали, что в общем случае энергетический барьер, препятствующий осуществлению подобного процесса достаточно велик. Поэтому стандартный механизм (рис. 1, *a–d*) не является эффективным в кристаллах при квазистатическом нагружении.



**Рис. 1.** Два механизма эмиссии решеточной дислокации из поры. *a* — исходное состояние твердого тела с порой, *b-d* — стандартный механизм, *e-g* — альтернативный механизм (подробнее см. текст).

Альтернативный (новый) механизм, предлагаемый в настоящей работе, осуществляется посредством наноскопического идеального сдвига, который обуславливает зарождение частичной дислокации, характеризующейся малым некристаллографическим значением модуля вектора Бюргерса, и последующее возрастание этого модуля до величины  $b_L$  вектора Бюргерса решеточной

дислокации или величины  $b_{GB}$  зернограничной дислокации. При этом дислокация с самого начала ее зарождения находится на конечном расстоянии (в первом приближении от 1 до 50 nm) от поры. Рассмотрим действие данного механизма подробно в случае зарождения решеточной дислокации (рис. 1, *a, e-g*). В начальный момент времени под действием приложенного внешнего

напряжения в ближайшей окрестности поры (в области концентрации напряжений) происходит идеальный наноскопический сдвиг кристаллической решетки (рис. 1, *e*). Величина  $b$  этого сдвига предполагается малой. Область, в которой осуществляется сдвиг (заштрихована на рис. 1, *e, f*), представляет собой дефект, подобный дефекту упаковки и называемый „обобщенным дефектом упаковки“. Обычный дефект упаковки является частным случаем (стабильной конфигурацией) обобщенного дефекта упаковки при определенном значении сдвига. Обобщенный дефект упаковки ограничен с одной стороны порой, а с другой — дислокацией с некристаллографическим сектором Бюргера  $\mathbf{b}$ , который характеризуется очень малой величиной (модулем, много меньшим модуля  $b_L$  вектора Бюргера решеточной дислокации). На следующем этапе модуль  $b$  вектора Бюргера непрерывно возрастает до величины модуля  $b_L$  вектора Бюргера решеточной дислокации. В этот момент дефект упаковки, который эволюционирует вместе с возрастанием вектора Бюргера  $\mathbf{b}$ , исчезает; на его месте восстанавливается идеальная кристаллическая структура. В финале реализуется конфигурация (рис. 1, *g*), полностью идентичная таковой в случае стандартного механизма испускания дислокации (рис. 1, *d*).

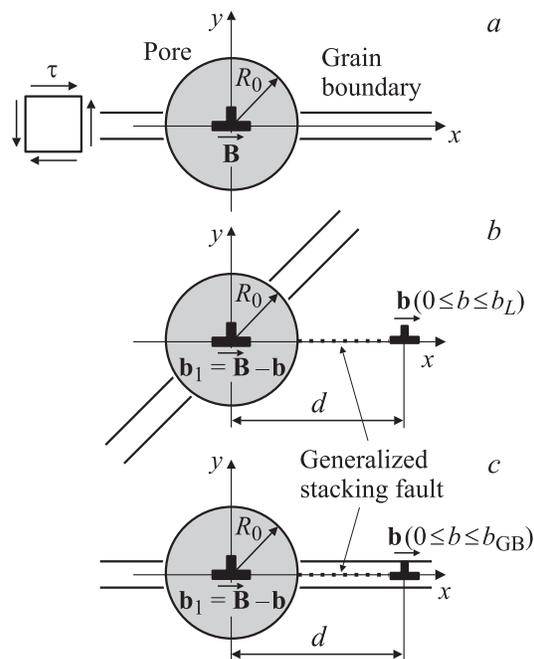
Обсуждаемый процесс испускания дислокации из поры эффективно описывается в рамках дислокационной теории как непрерывное нарастание модуля вектора Бюргера дислокации, зарождающейся на некотором расстоянии от поры, от 0 до величины  $b_L$  модуля вектора Бюргера решеточной дислокации. Случай, когда исходная пора сама характеризуется некоторым вектором Бюргера  $\mathbf{B}$  (см., например, [13]), можно трактовать как постепенное „перетекание“ вектора Бюргера из поры в испущенную дислокацию. Сама дислокация при этом остается неподвижной. Нарастание вектора Бюргера дислокации сопровождается изменением энергии обобщенного дефекта упаковки, формирующегося между порой и дислокацией, по некоторому закону, который описывается далее.

Наряду с испусканием решеточных дислокаций возможно испускание порами зернограничных дислокаций посредством наноскопического идеального сдвига. В этом случае зарождение частичной дислокации, характеризующейся малым некристаллографическим значением модуля вектора Бюргера, происходит в границе зерна, и этот модуль непрерывно возрастает до величины  $b_{GB}$  модуля вектора Бюргера совершенной зернограничной дислокации, где  $b_{GB}$  задается трансляционной симметрией границы зерна [17]. В целом процесс эмиссии зернограничных дислокаций протекает аналогично эмиссии решеточных дислокаций. Вместе с тем структура зернограничной фазы изначально менее упорядочена, чем структура тела зерна, а также характеризуется меньшей атомной плотностью. Поэтому следует ожидать, что обобщенный дефект упаковки, который связан с наноскопическим идеальным сдвигом

в границе зерна, характеризуется значительно меньшей энергией по сравнению с обобщенным дефектом упаковки в кристаллической решетке. При этом эмиссия зернограничных дислокаций будет осуществляться значительно легче эмиссии решеточных дислокаций. Поскольку с движением зернограничных дислокаций традиционно связывают процесс зернограничного скольжения [17], описываемый процесс потенциально может давать значительный вклад в пластическую деформацию в НКМ, в которых зернограничное скольжение играет существенную роль.

## 2. Энергетические характеристики испускания дислокаций порами посредством наноскопического идеального сдвига

Следуя подходу [13], рассчитаем энергетические характеристики процесса эмиссии (решеточных и зернограничных) дислокаций из поры посредством наноскопического идеального сдвига. Модель процесса схематически представлена на рис. 2. В рамках модели пора имеет цилиндрическую форму, характеризуется вектором Бюргера  $\mathbf{B}$  и может испускать решеточные и зернограничные дислокации под действием внешнего



**Рис. 2.** Эмиссия решеточных и зернограничных дислокаций из цилиндрических пор. *a* — исходная пора, характеризуемая вектором Бюргера  $\mathbf{B}$ , *b* — испускание решеточной дислокации путем наноскопического идеального сдвига с образованием обобщенного дефекта упаковки (пунктирная линия), *c* — испускание зернограничной дислокации путем наноскопического идеального сдвига с образованием обобщенного дефекта упаковки (пунктирная линия).

касательного напряжения  $\tau$ . Подобные поры, характеризующиеся ненулевым дислокационным зарядом, образуются в результате поглощения порами дислокаций или слияния дислокаций [13,18]. Поэтому кристаллическая решетка в окрестности поры оказывается искаженной, а сама пора является источником напряжений, подобным дислокации с вектором Бюргера  $\mathbf{B}$ , равным сумме векторов Бюргера дислокаций, в результате слияния которых возникла пора. Очевидно, что испускание дислокаций из пор с ненулевым значением вектора Бюргера  $\mathbf{B}$ , должно осуществляться значительно легче по сравнению со случаем  $\mathbf{B} = 0$  из-за дополнительных напряжений, создаваемых порой.

Рис. 2, *b* и *c* иллюстрируют процессы испускания решеточной и зернограничной дислокаций соответственно. Пунктирной линией изображен обобщенный дефект упаковки длиной  $d$ . Используем для расчета формулу для изменения энергии  $\Delta W'$  системы в результате зарождения дислокации с вектором Бюргера  $\mathbf{b}$  на расстоянии  $d$  от поры, найденную в [13]:

$$\begin{aligned} \Delta W' = & \frac{Db^2}{2} \left\{ \ln \frac{R_0}{r_0} + \ln(\tilde{d}^2 - 1) \right\} \\ & + \frac{Db^2}{2} \left\{ 1 - \frac{B}{b} \left( 2 \ln \tilde{d} + \frac{1}{\tilde{d}^2} \right) \right\} \\ & - \frac{Db^2}{2} \left\{ \frac{2\tau R_0}{Db} \left( \tilde{d} - \frac{2}{\tilde{d}} + \frac{1}{\tilde{d}^3} \right) \right\}. \quad (1) \end{aligned}$$

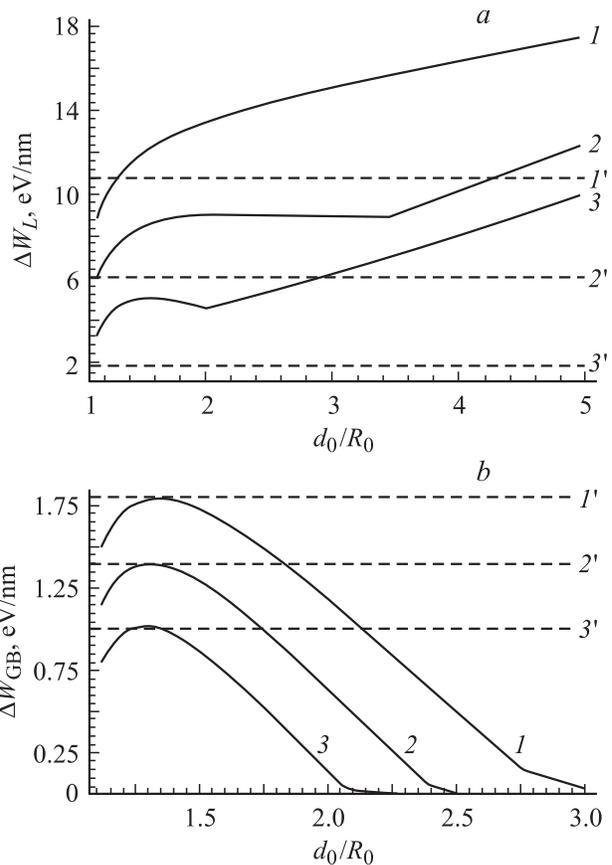
Здесь  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ ,  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $R_0$  — радиус поры,  $r_0$  — радиус обрезания дислокации  $b$ ,  $\tilde{d} = d/R_0$ .

В нашем случае к выражению (1) необходимо добавить энергию обобщенного дефекта упаковки, формирующегося между порой и дислокацией. Для случая испускания зернограничной дислокации мы воспользуемся выражением, использовавшимся ранее в работе [14].

$$W_\gamma^{\text{GB}} = \lambda \gamma_0 d \sin \frac{\pi b}{b_{\text{GB}}}, \quad (2)$$

где  $\lambda$  — некоторая постоянная меньшая единицы,  $\gamma_0$  — удельная энергия обычного (стабильного) дефекта упаковки (в расчете на единицу площади),  $b_{\text{GB}}$  — вектор Бюргера зернограничной дислокации. Синусоидальный характер зависимости (2) приводит к тому, что при  $b = b_{\text{GB}}/2$  энергия обобщенного дефекта упаковки достигает максимума  $W_\gamma^{\text{GB}} = \lambda \gamma_0 d$ , а при  $b = b_{\text{GB}}$  энергия  $W_\gamma^{\text{GB}} = 0$ . Коэффициент  $\lambda$  с физической точки зрения означает степень различия энергии обобщенного дефекта упаковки в границе и теле зерна. Первая энергия значительно меньше второй (см. обсуждение в разделе 1), что описывается условием  $\lambda < 1$ .

Для случая испускания решеточной дислокации мы воспользуемся специфической „двугорбой“ зависимостью энергии обобщенного дефекта упаковки от вектора



**Рис. 3.** Зависимость высоты энергетического барьера, препятствующего эмиссии дислокаций, от длины обобщенного дефекта упаковки  $d_0$  (отнесенной к радиусу поры  $R_0$ ) в Ni. *a* — эмиссия решеточных дислокаций, кривые 1–3 соответствуют величинам вектора Бюргера поры  $B = 0, b_L, 2b_L$ ; *b* — эмиссия зернограничных дислокаций, кривые 1–3 соответствуют величинам вектора Бюргера поры  $B = 0, 0.25b_L, 0.5b_L$ . Линии 1'–3' показывают высоту энергетического барьера для случаев обычного испускания дислокаций за счет скольжения. Величина внешнего напряжения полагалась равной  $\tau = 1$  ГПа, радиус поры  $R_0 = 10b_L$ .

Бюргера  $b$ , общий вид которой был предложен в [19] для нанокристаллического Ni:

$$W_\gamma^L = \gamma'(b)d,$$

где

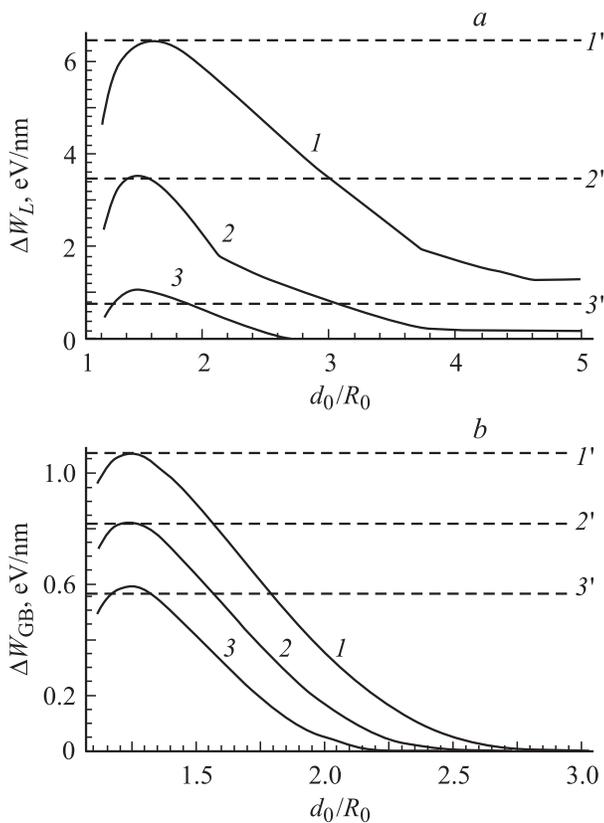
$$\gamma'(b) = \begin{cases} \gamma_m \sin \frac{2\pi b}{b_L}, & b < \frac{b_L}{4}, \\ \frac{\gamma_m + \gamma_0}{2} - \frac{\gamma_m - \gamma_0}{2} \cos \frac{4\pi b}{b_L}, & \frac{b_L}{4} \leq b < \frac{3b_L}{4}, \\ -\gamma_m \sin \frac{2\pi b}{b_L}, & \frac{3b_L}{4} \leq b \leq b_L. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь  $b_L$  — вектор Бюргера решеточной дислокации, а  $\gamma_m$  некоторое максимальное значение удельной энергии обобщенного дефекта упаковки, соответствующее нестабильной конфигурации дефекта. Таким образом, полное изменение энергии системы в результате формирования

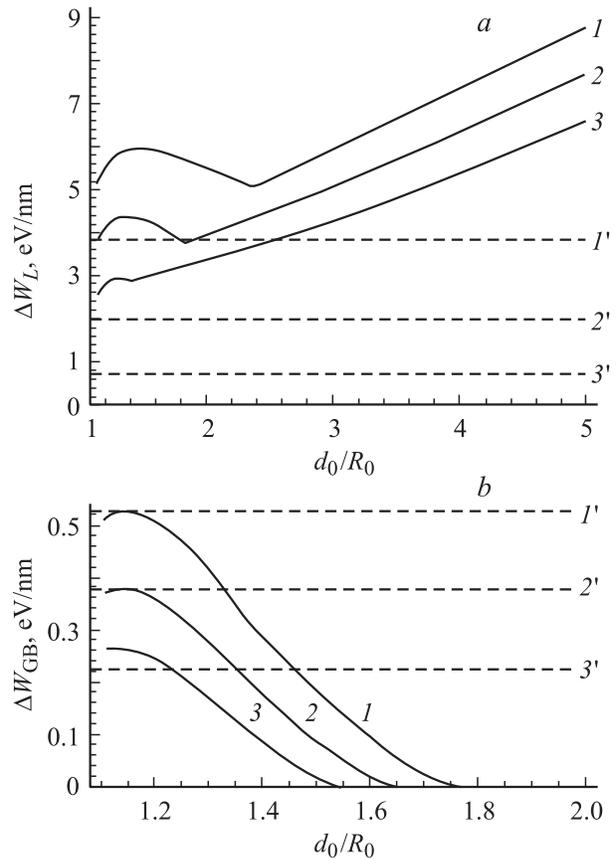
обобщенного дефекта упаковки и дислокации вблизи поры задается выражением  $\Delta W_L = \Delta W' + W_\gamma^L$  для случая испускания решеточной дислокации и выражением  $\Delta W_{GB} = \Delta W' + W_\gamma^{GB}$  для случая испускания зернограничной дислокации.

### 3. Энергетический барьер и критическое расстояние между порой и дислокацией

Рассчитаем зависимость высоты энергетического барьера, препятствующего испусканию дислокаций из пор от длины  $d_0$  области наноскопического идеального сдвига (обобщенного дефекта упаковки) для таких ГЦК-металлов, как Ni, Cu и Al. Для этих материалов характерны следующие значения параметров [20,21]: для Ni параметр решетки  $a = 3.52 \text{ \AA}$ ,  $G = 73 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.34$ ,  $\gamma_0 = 0.183 \text{ J/m}^2$ ; для Cu  $a = 3.61 \text{ \AA}$ ,  $G = 48 \text{ GPa}$ ,

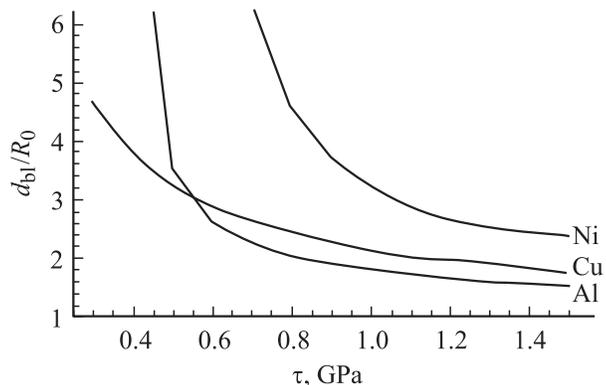


**Рис. 4.** Зависимость высоты энергетического барьера, препятствующего эмиссии дислокаций, от длины обобщенного дефекта упаковки  $d_0$  (отнесенной к радиусу поры  $R_0$ ) в Cu. *a* — эмиссия решеточных дислокаций, кривые 1–3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B = 0, b_L, 2b_L$ ; *b* — эмиссия зернограничных дислокаций, кривые 1–3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B = 0, 0.25b_L, 0.5b_L$ . Линии 1'–3' показывают высоту энергетического барьера для случаев обычного испускания дислокаций за счет скольжения. Величина внешнего напряжения полагалась равной  $\tau = 1 \text{ GPa}$ , радиус поры  $R_0 = 10b_L$ .



**Рис. 5.** Зависимость высоты энергетического барьера, препятствующего эмиссии дислокаций, от длины обобщенного дефекта упаковки  $d_0$  (отнесенной к радиусу поры  $R_0$ ) в Al. *a* — эмиссия решеточных дислокаций, кривые 1–3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B = 0, b_L, 2b_L$ ; *b* — эмиссия зернограничных дислокаций, кривые 1–3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B = 0, 0.25b_L, 0.5b_L$ . Линии 1'–3' показывают высоту энергетического барьера для случаев обычного испускания дислокаций за счет скольжения. Величина внешнего напряжения полагалась равной  $\tau = 1 \text{ GPa}$ , радиус поры  $R_0 = 10b_L$ .

$\nu = 0.34$ ,  $\gamma_0 = 0.045 \text{ J/m}^2$ ; для Al  $a = 4.04 \text{ \AA}$ ,  $G = 26.5 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.345$ ,  $\gamma_0 = 0.122 \text{ J/m}^2$ . Типичный решеточный вектор Бюргерса для ГЦК-металлов равен  $b_L = a/\sqrt{2}$ , зернограничный вектор Бюргерса будем полагать равным  $b_{GB} = 1 \text{ \AA}$ , радиус обрезания, фигурирующий в (1),  $r_0 = b$ . Постоянные  $\lambda \approx 0.1$  [14],  $\gamma_m = 1.25\gamma_0$ . На рис. 3–5 приведены результаты расчетов испускания из поры радиусом  $R_0 = 10b_L$  зернограничных (рис. 3, *a*; 4, *a*; 5, *a*) и решеточных (рис. 3, *b*; 4, *b*; 5, *b*) дислокаций для разных значений вектора Бюргерса  $B$  поры для Ni, Cu и Al соответственно. Штриховыми линиями показаны высоты энергетических барьеров для случая традиционного испускания (рассчитываемые по формуле (1); см. [13]). Видно, что при определенных условиях высота барьера может падать до нуля, т.е. возможен переход к безбарьерному испусканию дислокаций. Очевидно также, что испускание зернограничных дислокаций при



**Рис. 6.** Зависимость критической длины обобщенного дефекта упаковки  $d_{bl}$ , при которой осуществляется переход к безбарьерному испусканию, от величины внешнего напряжения для эмиссии зернограничных дислокаций в Ni, Cu и Al ( $\tau = 1$  GPa, радиус поры  $R_0 = 10b_L$ ,  $B = 0$ ).

прочих равных условиях осуществляется значительно легче по сравнению с решеточными, что особенно хорошо видно на примере Ni и Al (рис. 3, а и 5, а), в которых из-за высокой энергии дефекта упаковки высота барьера, препятствующего испусканию решеточных дислокаций, начиная с определенного момента, растет с возрастанием длины обобщенного дефекта упаковки.

Зависимость критической длины  $d_{bl}$ , при которой происходит переход к безбарьерной эмиссии от величины внешнего напряжения, приведена на рис. 6 для случая зернограничных дислокаций и пор без дислокационного заряда ( $B = 0$ ). Результат вполне ожидаемый — чем выше внешнее напряжение, тем короче критическая длина  $d_{bl}$  области наноскопического идеального сдвига, и, как следствие, облегчается испускание дислокаций. Переход к безбарьерному испусканию в случае решеточных дислокаций при  $B = 0$  оказывается практически невозможным для Ni и Al из-за высокой энергии дефекта упаковки. Для Ni безбарьерное испускание становится возможным при напряжениях выше  $\tau_c = 5.6$  GPa, а в Al  $\tau_c = 3.4$  GPa — недостижимые на практике величины. Для Cu критическое напряжение такого же перехода составляет  $\tau_c = 1.4$  GPa, что также является значительной величиной. Для зернограничных дислокаций переход к безбарьерному испусканию теоретически возможен вплоть до достаточно малых напряжений.

#### 4. Заключение

Таким образом, испускание решеточных и зернограничных дислокаций порами в НКМ при механическом нагружении возможно путем наноскопического идеального сдвига. При этом дислокация зарождается на конечном расстоянии от поры, а модуль ее вектора Бюргерса непрерывно увеличивается от нуля до модуля вектора Бюргерса решеточной или зернограничной дислокации.

Испускание дислокации путем наноскопического идеального сдвига в нанокристаллических Ni, Al и Cu является энергетически выгодным и безбарьерным процессом при достаточно высоких значениях внешнего напряжения. Испускание зернограничных дислокаций при прочих равных условиях осуществляется значительно легче по сравнению с решеточными дислокациями. Это обуславливает значительное влияние исследуемого процесса испускания зернограничных дислокаций порами в НКМ в условиях, когда зернограничное скольжение вносит существенный вклад в пластическую деформацию.

#### Список литературы

- [1] K.S. Kumar, S. Suresh, H. Swygenhoven. *Acta Mater.* **51**, 5743 (2003).
- [2] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. *ФТТ* **47**, 793 (2005).
- [3] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев. *ФТТ* **47**, 816 (2005).
- [4] Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, Ю.В. Петров, А.Г. Шейнерман. *Докл. РАН* **406**, 480 (2006).
- [5] X. Zhang, H. Wang, C.C. Koch. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **6**, 53 (2004).
- [6] B.Q. Han, E. Lavernia, F.A. Mohamed. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **9**, 1 (2005).
- [7] Y.M. Wang, E. Ma. *Acta Mater.* **52**, 1699 (2004).
- [8] K.M. Youssef, R.O. Scattergood, K.L. Murty, J.A. Horton, C.C. Koch. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 091 904 (2005).
- [9] S.X. McFadden, R.S. Mishra, R.Z. Valiev, A.P. Zhilyaev, A.K. Mukherjee. *Nature* **398**, 684 (1999).
- [10] A.K. Mukherjee. *Mater. Sci. Eng. A* **322**, 1 (2002).
- [11] П.Г. Черемской, В.В. Слезов, В.И. Бетехтин. *Поры в твердом теле. Энергоатомиздат, М.* (1990). 376 с.
- [12] V.A. Lubarda, M.S. Schneider, D.H. Kalantar, B.A. Remington, M.A. Meyers. *Acta Mater.* **52**, 1397 (2004).
- [13] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **11**, 46 (2006).
- [14] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 211 901 (2006).
- [15] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **54**, 2489 (2006).
- [16] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *J. Phys.: Cond. Matter* **18**, L225 (2006).
- [17] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. *Interfaces in crystalline materials.* Oxford Science Publ., Oxford (1996).
- [18] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *Phil. Mag.* **86**, 1415; 3487 (2006).
- [19] X.-L. Wu, Y.T. Zhu, E. Ma. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 121 905 (2006).
- [20] R.J. Asaro, S. Suresh. *Acta Mater.* **53**, 3369 (2005).
- [21] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций.* Атомиздат, М. (1972). 600 с.