Физика твердого тела, 1997, том 39, № 2

Квазипериодические границы зерен и межзеренное скольжение в кристаллических и квазинанокристаллических твердых телах

© *И.А. Овидько*

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

(Поступила в Редакцию 25 июля 1996 г.)

Исследуется взаимосвязь между геометрическими и пластическими свойствами квазипериодических границ зерен в кристаллах. С помощью метода волн плотности проводится теоретическое описание трансляционных и фазонных (связанных с относительными смещениями соседних кристаллических зерен) степеней свободы квазипериодической границы. Изучается роль квазипериодических границ зерен в процессах межзеренного скольжения. Квазинанокристаллические твердые тела (наноструктурные поликристаллы с квазипериодическими границами зерен) определяются в работе как новый тип наноструктурных материалов, деформационные характеристики которых обусловлены пластическими свойствами квазипериодических границ зерен.

Известно, что границы зерен оказывают существенное влияние на поведение поликристаллических твердых тел (см., например, [1]). При изучении роли зернограничной фазы в поликристаллах обычно рассматриваются периодически упорядоченные границы зерен. Вместе с тем наряду с периодическими границами в поликристаллах могут присутствовать и квазипериодические границы зерен, которые характеризуются иррациональными параметрами разориентировки [2–4]. Особый тип трансляционного упорядочения, присущий квазипериодическим границам, обусловливает их физические свойства, которые отличны от свойств "стандартных" периодических границ [2–7]. Основная цель настоящей работы — теоретическое изучение пластических свойств квазипериодических границ зерен. В связи с этим в работе с помощью метода волн плотности дано описание обычных трансляционных и особых (связанных с относительным смещением соседних кристаллических зерен) фазонных степеней свободы квазипериодической границы (раздел 2), выявлены особенности межзеренного скольжения, локализующегося в квазипериодических границах (разделы 3 и 4), дано определение квазинанокристаллических твердых тел (наноструктурных поликристаллов с квазипериодическими границами) и проведен анализ влияния квазипериодических границ зерен на пластические свойства наноструктурных поликристаллов (раздел 4). Поскольку понятие квазипериодических границ зерен не является традиционно используемым в физике твердого тела, перед изложением основной части настоящей работы (разделы 2–4) мы приводим также определение квазипериодических границ зерен (раздел 1), основанное на материале статей [2–4].

1. Определение квазипериодических границ зерен в кристаллах

Рассмотрим границу зерен, разделяющую два кристаллических зерна одинаковой структуры. Пусть $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ и $\mathbf{e}_4$, $\mathbf{e}_5$, $\mathbf{e}_6$ являются кристаллографическими базисами зерен, разориентировка между которыми однозначно характеризуется тремя углами — параметрами разориентировки.

Вообще говоря, параметры разориентировки могут быть как рациональными, так и иррациональными. Если все параметры разориентировки, задающие связь между кристаллографическими базисами соседних зерен, являются рациональными, то векторы из базиса $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ связаны с векторами из базиса $\mathbf{e}_4$, $\mathbf{e}_5$, $\mathbf{e}_6$ линейными соотношениями с рациональными коэффициентами. При этом только три вектора из множества векторов $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_6$ являются независимыми. Здесь и далее множество p векторов $\mathbf{Y}_1, \ldots, \mathbf{Y}_p$ называется независимым (линейно независимым над полем рациональных чисел), если для рациональных чисел $r_1, \ldots, r_p$ линейная комбинация $r_1\mathbf{Y}_1 + \cdots + r_p\mathbf{Y}_p = 0$ только в случае $r_1 = \cdots = r_p = 0$. В данной (хорошо изученной) ситуации межзеренная граница характеризуется периодическим трансляционным порядком.

Если k ($3 \geq k \geq 1$) параметров разориентировки являются иррациональными, то линейные соотношения между векторами из базиса $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ и векторами из базиса $\mathbf{e}_4$, $\mathbf{e}_5$, $\mathbf{e}_6$ содержат иррациональные коэффициенты. При этом $n > 3$ векторов из множества $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_6$ являются независимыми, где число n варьируется от четырех до шести в зависимости от числа иррациональных параметров разориентировки и типа (наклон, кручение) границы. В этой ситуации дальний трансляционный порядок межзеренной границы отличается от периодического [2–4].

Для выявления характера трансляционного порядка межзеренной границы с иррациональными параметрами разориентировки рассмотрим, следуя [3], свойства обратных решеток кристаллических зерен, примыкающих к такой границе. Легко проверить то, что фурье-преобразование функций, описывающих положения узлов кристаллических решеток, не влияет на линейную зависимость/независимость векторов таких решеток. Поэтому базисы $\mathbf{q}_1$, $\mathbf{q}_2$, $\mathbf{q}_3$ и $\mathbf{q}_4$, $\mathbf{q}_5$, $\mathbf{q}_6$ обратных решеток кристаллических зерен, разориентировка между которыми характеризуется иррациональными параметрами, удовлетворяют следующему условию: $n > 3$ векторов из множества $\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_6$ являются независимыми. Операция свертки обратных решеток также не влияет на линейную зависимость/независимость векторов решеток. Как следствие обратная решетка границы зерна с иррациональными параметрами разориентировки, определяющаяся сверткой обратных решеток примыкающих к границе зерен, имеет $n > 3$ базисных векторов.

Таким образом, трехмерная граница зерна с иррациональными параметрами разориентировки имеет обратную решетку с размерностью базиса (числом независимых базисных векторов) n, которая больше размерности самой границы (равной трем). Свойство D-мерной системы иметь обратную решетку с размерностью базиса превосходящей размерность самой системы D, называют квазипериодическим трансляционным порядком, или квазипериодичностью [3,8]. Это позволило авторам [3] определить границы зерен с иррациональными параметрами разориентировки как квазипериодические (или, иными словами, как границы зерен с квазипериодическим трансляционным порядком). Это также позволит нам в следующих разделах использовать средства теории квазипериодических систем для описания свойств границ зерен с иррациональными параметрами разориентировки.

2. Описание квазипериодических границ в терминах волн плотности. Степени свободы квазипериодических границ зерен

При описании твердых тел в терминах волн плотности в качестве основной характеристики твердотельной структуры используют функцию ее атомной плотности (см., например, [8,9]). Основываясь на приведенном в предыдущем разделе определении квазипериодических границ зерен, представим характеристическую функцию атомной плотности квазипериодической границы $\rho(\mathbf{x})$ в виде следующего ряда фурье:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{l=1}^{n} |\rho_l| \exp i(\mathbf{q}_l \mathbf{x} + \varphi_l), \tag{1}$$

где $\mathbf{x}$ — пространственная координата, $|\rho_l|$ — скалярные амплитуды, $\mathbf{q}_l$ — независимые базисные векторы обратной решетки, φ_l — скалярные фазы. Для $l = 1, 2, 3$ ($l = 4, 5, 6$) сдвиг по фазе φ_l однозначно соответствует определенному смещению первого (второго) кристаллического зерна, примыкающего к границе, в направлении $\mathbf{e}_l$.

Число n ($4 \leq n \leq 6$) независимых векторов $\mathbf{q}_l$ обратной решетки, фигурирующих в фурье-разложении (1) функции $\rho(\mathbf{x})$, больше размерности $D = 3$ вектора $\mathbf{x}$ — аргумента функции $\rho(\mathbf{x})$. В математике функции с такими свойствами называют квазипериодическими [10].

Исследуем теперь с помощью формализма Гинзбурга–Ландау свойства квазипериодических границ зерен, которые зависят только от симметрии таких границ. Плотность свободной энергии Гинзбурга–Ландау L, описывающей симметрии квазипериодической границы, может быть разложена по степеням функции атомной плотности $\rho(\mathbf{x})$. При этом k-й член разложения содержит произведения вида

$$|\rho_1|^{s_1} \ldots |\rho_n|^{s_n} e^{i(z_1\mathbf{q}_1 + \cdots + z_n\mathbf{q}_n)\mathbf{x}} e^{i(z_1\varphi_1 + \cdots + z_n\varphi_n)} (-\text{c. c.}), \tag{2}$$

где z_l — целые числа, $s_l = 0, \ldots, k$, $|z_l| < s_l$ и $s_1 + \cdots + s_n = k$.

Чтобы получить выражение для свободной энергии, необходимо провести интегрирование произведений вида (2) по пространственной координате $\mathbf{x}$. Для случая $z_1\mathbf{q}_1 + \cdots + z_n\mathbf{q}_n \neq 0$ все интегралы по $\mathbf{x}$ от произведений вида (2) равны нулю. Интегралы же от выражений (2) с $z_1\mathbf{q}_1 + \cdots + z_n\mathbf{q}_n = 0$ являются ненулевыми. Однако, поскольку векторы $\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n$ являются независимыми, линейная комбинация таких векторов с коэффициентами z_l равна нулю, только если $z_1 = \cdots = z_n = 0$. В результате получаем, что интегрирование по $\mathbf{x}$ не превращает в нуль только произведения вида (2) с параметрами z_l, удовлетворяющими условию $z_1 = \cdots = z_n = 0$. Для таких произведений фактор $\exp i(z_1\varphi_1 + \cdots + z_n\varphi_n) = 1$ для любых значений фаз $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$. Таким образом, свободная энергия L инвариантна относительно любых изменений n фаз $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$. Фазы $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$ являются гидродинамическими (голдстоуновскими) модами, или, иными словами, степенями свободы квазипериодической границы зерна.

Рассмотрим для определенности квазипериодическую границу зерна с $n = 6$ степенями свободы $\varphi_1, \ldots, \varphi_6$. Эти степени свободы (как фазы в разложении (1)) однозначно соответствуют (независимым) смещениям кристаллических зерен, примыкающих к границе. Для описания участия квазипериодических границ в межзеренном скольжении (см. следующие разделы) удобно разделить степени свободы квазипериодической границы на обычные трансляционные и особые фазонные (соответствующие межзеренному скольжению) степени. Для этого взаимооднозначно сопоставим множеству степеней свободы $\varphi_1, \ldots, \varphi_6$ два трехмерных вектора, а именно вектор смещений $\mathbf{U}$ и фазонный вектор $\mathbf{W}$, которые связаны с трехмерными векторами смещений $\mathbf{U}_1$ и $\mathbf{U}_2$ соответственно первого и второго зерен следующими соотношениями:

$$\mathbf{U} = \frac{1}{2}(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2), \tag{3}$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{\alpha}(\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2), \tag{4}$$

где α — масштабный фактор. При этом вектор $\mathbf{U}$, соответствующий совместным смещениям соседних зерен (см. (3)), характеризует (обычные) трансляционные степени свободы квазипериодической границы. Вектор $\mathbf{W}$, соответствующий относительным смещениям соседних зерен (см. (4)), характеризует (особые) фазонные степени свободы квазипериодической границы зерна.

Для квазипериодических границ с $n = 4$ и 5 степенями свободы также удобно переопределение степеней свободы в терминах трехмерного вектора смещений $\mathbf{U}$ и $(n-3)$-мерного фазонного вектора $\mathbf{W}$. При этом вектор $\mathbf{U}$ задается формулой (3), а компонентами фазонного вектора $\mathbf{W}$ являются независимые от $\mathbf{U}$ компоненты вектора относительных смещений соседних зерен, задаваемого формулой (4).

Как было показано выше в рамках описания в терминах волн плотности, свободная энергия квазипериодической границы не меняется при изменениях фаз φ_l (являющихся компонентами векторов смещений зерен $\mathbf{U}_1$ и $\mathbf{U}_2$) и, следовательно, при изменениях характеристического фазонного вектора $\mathbf{W}$ (являющегося линейной комбинацией векторов $\mathbf{U}_1$ и $\mathbf{U}_2$, см. (4)). Таким образом, в рамках описания в терминах волн плотности любое относительное смещение кристаллических зерен (примыкающих к квазипериодической границе), описываемое изменением характеристического фазонного вектора $\mathbf{W}$, не требует никаких энергетических затрат; такое смещение (межзеренное скольжение) является безбарьерным.

Полученный результат является приближенным, поскольку описание в терминах волн плотности не учитывает дискретного характера зернограничной структуры. Для уточнения полученного результата в следующем разделе будет использован дискретный подход, основанный на представлениях модели структурных единиц границ зерен в кристаллах.

3. Модель структурных единиц квазипериодических границ зерен. Квазипериодические границы и однородное межзеренное скольжение

В рамках дискретного подхода каждая квазипериодическая граница зерна по аналогии с квазикристаллами (см., например, [11,12]) может быть представлена как квазипериодически упорядоченный ансамбль структурных единиц (атомных кластеров) [2,4]. Так, квазипериодические межзеренные границы наклона эффективно моделируются как квазипериодические последовательности структурных единиц двух типов A и B [4].

В сжатой формулировке различие между периодическими и квазипериодическими границами наклона связано со следующим. Для периодической границы бесконечной длины отношение (бесконечного) числа C_A структурных единиц A к (бесконечному) числу C_B структурных единиц B (C_A/C_B) есть рациональное число. Для квазипериодической границы бесконечной длины отношение соответствующих чисел C'_A и C'_B структурных единиц A и B (C'_A/C'_B) есть иррациональное число.

В определенном смысле бесконечная квазипериодическая граница может трактоваться как периодическая граница с бесконечно большим периодом. Каждая реальная квазипериодическая граница, имеющая конечную длину, рассматривается как конечный фрагмент бесконечной квазипериодической границы с иррациональным отношением C'_A/C'_B и характеризуется рациональным отношением C_A/C_B, которое наиболее близко к C'_A/C'_B при данной длине (общем числе структурных единиц) границы.

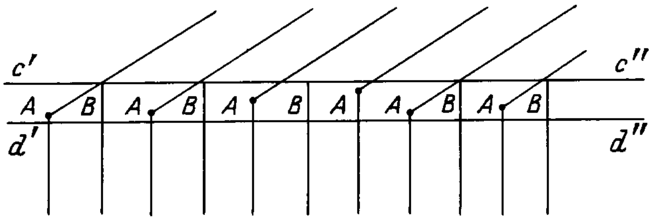

Рис. 1. Модель структурных единиц квазипериодической границы наклона в слоистом бикристалле.

Каждое относительное смещение кристаллических зерен, примыкающих к квазипериодической границе, сопровождается определенной фазонной трансформацией зернограничной структуры, которая описывается соответствующим изменением характеристического фазонного вектора $\mathbf{W}$ (см. раздел 2). В рамках дискретного представления квазипериодических границ как ансамблей структурных единиц фазонные трансформации каждой квазипериодической границы являются особыми перестановками ее структурных единиц. В качестве иллюстрации вышесказанного рассмотрим связь между относительными смещениями соседних зерен и фазонными трансформациями квазипериодической границы наклона в слоистом бикристалле (рис. 1). При этом будем моделировать структуру такой границы как последовательность структурных единиц A и B, которая определяется относительным смещением и (иррациональной) разориентировкой кристаллических зерен следующим образом. Относительное смещение и разориентировка зерен однозначно определяют положения узлов (точек пересечения в двумерном случае и линий пересечения в трехмерном случае), в которых слои соседних зерен пересекаются внутри межзеренной границы — полосы, ограниченной прямыми $c'c''$ и $d'd''$ (рис. 1). В рамках модели структурные единицы A границы соответствуют вышеуказанным узлам, а структурные единицы B — слоям первого зерна, которые не пересекаются со слоями второго зерна внутри межзеренной границы наклона (рис. 1).

Рассмотрим пространственно однородное относительное смещение кристаллических зерен, примыкающих к квазипериодической границе, т. е. перемещение одного зерна как целого относительно другого зерна (рис. 2). Каждое такое смещение реализуется через перестановки типа $A \leftrightarrow B$ в границе (рис. 2), которые в совокупности и представляют собой однородную (соответствующую пространственно однородному смещению зерен) фазонную трансформацию

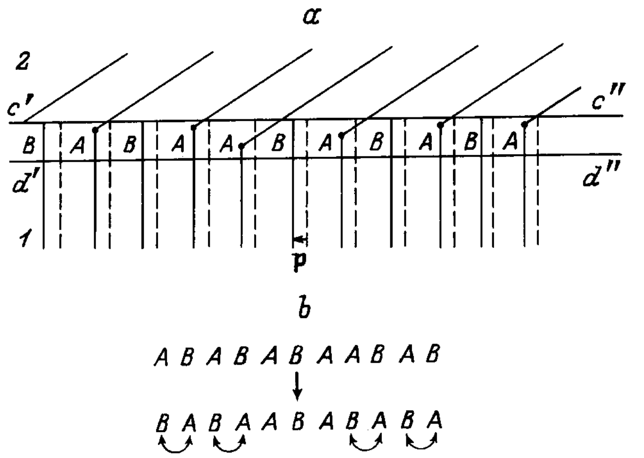

Рис. 2. Пространственно однородное смещение слоистых зерен, примыкающих к квазипериодичыеской границе. *a*) Нижнее зерно (*1*) перемещается (из положения, изображенного на рис. 1) как целое относительно верхнего зерна (*2*) на вектор **P**. *b*) Соответствующая однородная фазонная трансформация квазипериодической границы как совокупность перестановок типа $A \leftrightarrow B$ в характеристической (квазипериодической) последовательности символов структурных единиц.

квазипериодической границы наклона. Перестановки типа $A \leftrightarrow B$ в границе связаны с диффузионными перескоками атомов, каждый из которых требует преодоления энергетического барьера ΔE (энергии активации зернограничной диффузии). Как следствие в рамках дискретного подхода пространственно однородные относительные смещения соседних зерен, реализующиеся через фазонные трансформации квазипериодической границы наклона в слоистом бикристалле, характеризуются ненулевой энергией активации ΔE. Вышесказанное справедливо и для квазипериодических границ зерен произвольного типа в кристаллах.

Следует подчеркнуть, что пространственно однородные относительные смещения кристаллических зерен эффективно осуществляются через однородные фазонные трансформации квазипериодической границы без какого-либо участия зернограничных дефектов (в частности, дислокаций); квазипериодические границы даже в бездефектном состоянии "готовы" быть носителями межзеренного скольжения. Эта особенность существенно отличает квазипериодические границы от периодических.

4. Квазипериодические границы зерен в наноструктурных поликристаллах. Квазинанокристаллические твердые тела

Влияние границ зерен на поведение поликристаллических материалов тем заметнее, чем выше объемная доля зернограничной фазы в таких материалах. В наноструктурных поликристаллах (с характеристическим размером зерна 5–20 nm) объемная доля зернограничной фазы составляет 10–50 % от общего объема. Это обусловливает определяющее влияние границ зерен на физические и механические свойства наноструктурных поликристаллов, которые обычно существенно отличаются от соответствующих свойств обычных поликристаллов (см., например, [13–15]). В связи с этим и в контексте настоящей статьи особый интерес представляет изучение роли квазипериодических границ зерен в наноструктурных поликристаллах.

Рассмотрим вначале предельную ситуацию, в которой наноструктурный поликристалл содержит только квазипериодические границы. Эта ситуация радикально отличается от обычно моделируемой ситуации [13,14], в которой наноструктурные поликристаллы содержат периодические и/или неупорядоченные границы зерен. Действительно, структура и свойства квазипериодических границ существенно отличаются от структуры и свойств как периодических, так и неупорядоченных границ [2–7] (см. также предыдущие разделы); с термодинамической и кристаллографической точек зрения квазипериодическая зернограничная фаза отлична от периодической и неупорядоченной зернограничных фаз. В то же время влияние границ зерен на поведение наноструктурных поликристаллов является определяющим. Вышеизложенное позволяет рассматривать наноструктурные поликристаллы, содержащие только квазипериодические границы зерен, как новый (ранее не исследовавшийся) тип наноструктурных материалов, структура и свойства которых существенно отличны от структуры и свойств "стандартных" наноструктурных поликристаллов с периодическими и/или неупорядоченными границами.

Поскольку наноструктура и квазипериодические границы зерен являются определяющими элементами рассматриваемых материалов нового типа, мы назовем их квазинанокристаллическими твердыми телами.

Следует отметить, что с помощью современных технологий синтеза наноструктурных материалов обычно получают наноструктурные поликристаллы, характеризуемые хаотическим распределением разориентировок между нанокристаллитами. Поэтому реальные наноструктурные поликристаллы содержат и периодические, и неупорядоченные, и квазипериодические границы. В связи с этим введенное выше понятие квазинанокристаллических твердых тел в настоящее время имеет прежде всего методологическое значение и может использоваться как вспомогательное понятие при изучении свойств реальных наноструктурных поликристаллов.

Перейдем теперь к обсуждению влияния квазипериодических границ на пластические свойства квазинанокристаллических твердых тел и реальных наноструктурных поликристаллов. Поскольку в наноструктурных материалах плотность мобильных решеточных дислокаций низка в нанокристаллитах [16], межзеренное скольжение обеспечивает основной вклад в процессы пластической деформации в таких материалах [14,17]. Межзеренное скольжение в квазипериодических границах может осуществляться как за счет однородных фазонных трансформаций (раздел 3), так и за счет движения зернограничных дислокаций, свойства которых отличны от свойств зернограничных дислокаций в периодических границах. В частности, спектры разрешенных векторов Бюргерса в квазипериодических границах содержат непрерывные линии, плоскости или трехмерные области [3,4], в то время как векторы Бюргерса зернограничных дислокаций в периодических границах квантованы. Например, как показано в [4], зернограничные дислокации в квазипериодических границах наклона могут иметь любую перпендикулярную оси наклона компоненту вектора Бюргерса в плоскости границы. В дальнейшем для определенности будем исследовать межзеренное скольжение, осуществляемое посредством движения зернограничных дислокаций с малыми векторами Бюргерса в квазипериодических границах наклона, поскольку (как показано далее) именно такие дислокации легко генерируются и перемещаются в квазипериодических границах наклона, обусловливая специфическую (и потому интересную в контексте настоящей статьи) зернограничную пластичность.

Рассмотрим дислокацию в квазипериодической границе наклона, характеризуемую вектором Бюргерса $\mathbf{b}'$, который перпендикулярен оси наклона границы в плоскости границы и по модулю много меньше характеристического вектора Бюргерса $\mathbf{b}$ ($b \approx a/10$, где a — параметр кристаллической решетки) дислокаций в периодической границе: $b' \ll a/10$. Дислокации с малым вектором Бюргерса $\mathbf{b}'$ могут генерироваться источником Франка–Рида в квазипериодической границе под действием критического касательного напряжения $\tau' \approx Gb'/\tilde{l}$ (где $\tilde{l}$ — расстояние между узлами источника Франка–Рида, G — модуль сдвига [18]), величина которого существенно меньше критического касательного напряжения $\tau \approx Gb/\tilde{l}$, активирующего источник Франка–Рида в периодической границе. Так, для $b \approx a/10$, $b' \approx a/50$ и $\tilde{l} \approx 10a$ получаем $\tau' \approx G/500 \ll \tau \approx G/100$.

Дислокации с малым вектором Бюргерса $\mathbf{b}'$, интенсивно генерируемые в квазипериодической границе наклона под действием низких касательных напряжений τ', формирует плоские скопления, которые способны эффективно перемещаться в квазипериодической границе под действием тех же низких касательных напряжений (благодаря эффекту концентрации напряжений в голове скопления). В результате межзеренное скольжение под действием низких касательных напряжений интенсивно развивается в квазипериодических границах наклона, которые поэтому играют роль пластичных элементов структуры наноструктурных поликристаллов.

Оценки влияния квазипериодических границ наклона на пластические характеристики наноструктурных поликристаллов, содержащих периодические и квазипериодические границы. При этом будем моделировать наноструктурные поликристаллы как композиты, состоящие из матрицы (наноструктурной поликристаллической фазы с периодическими границами зерен) и пластичных элементов с квазипериодическими границами наклона). В первом приближении напряжение течения σ наноструктурного поликристалла, моделируемого как композит, эффективно представимо с помощью стандартной формулы аддитивного сложения механических характеристик фаз композитов следующим образом:

$$\sigma \approx v\sigma_Q + (1-v)\sigma_M. \tag{5}$$

Здесь v — объемная доля квазипериодических границ наклона, σ_M — напряжение течения матрицы, σ_Q — напряжение межзеренного скольжения, локализованного в квазипериодических границах наклона.

Обсудим последовательно величины v, σ_Q и σ_M, фигурирующие в (5). В соответствии с проведенным выше рассмотрением, напряжение σ_Q задается критическим касательным напряжением, активирующим источники Франка–Рида в квазипериодической границе: $\sigma_Q \approx \tau'/M$, где M — стандартный ориентационный фактор.

В рамках предлагаемой модели особенности наноструктуры нанокристаллическог[Во материала связываются с присутствием квазипериодических границ в таком материале. Как следствие напряжение течения матрицы (наноструктурной поликристаллической фазы с периодическими границами) σ_M определяется так же, как и для обычного поликристалла, а именно с помощью стандартной формулы Холла–Петча

$$\sigma_M = \sigma_0 + \tilde{k}d^{-1/2}. \tag{6}$$

Здесь σ_0 — напряжение течения монокристалла, $\tilde{k}$ — константа Холла–Петча, d — размер зерна.

Объемную долю v, занимаемую квазипериодическими границами наклона, можно представить в виде произведения $v = v_1 v_2$, где v_1 — объемная доля зернограничной фазы в наноструктурном поликристалле, а v_2 — доля квазипериодических границ наклона в зернограничной фазе. Согласно [19], $v_1 \approx 3\varkappa/d$, где $\varkappa(\approx 3a)$ — характеристическая ширина границы зерна. В результате получаем

$$v \approx 9av_2/d. \tag{7}$$

Подставляя (6) и (7) в (5), получаем следующую приближенную формулу для σ:

$$\sigma \approx \sigma_0 + \tilde{k}d^{-1/2} + 9v_2 a(\tau'/M - \sigma_0)d^{-1} - 9v_2 a\tilde{k}d^{-3/2}. \tag{8}$$

Для характеристических значений $a \approx 3 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$, $\tau' \approx G/500$, $M \approx 0.5$, $G \approx 65\,\mathrm{GPa}$, $\sigma_0 \approx 66\,\mathrm{MPa}$

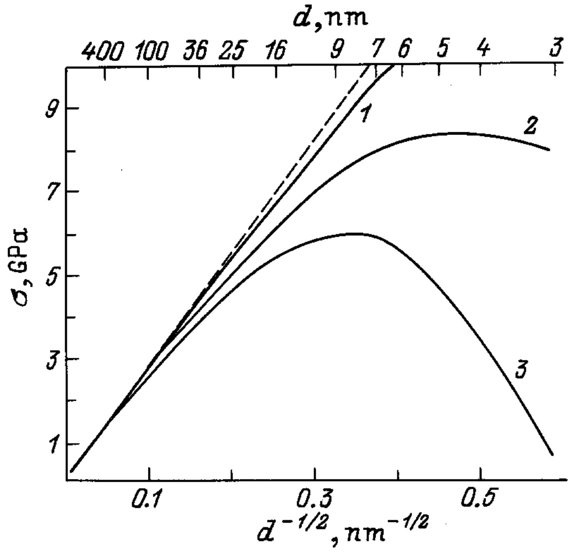

Рис. 3. Зависимость напряжения течения σ от размена зерна d, задаваемая формулой (8) при различных значениях v_2. v_2: *1* — 0.1, *2* — 0.5, *3* — 1. Штриховая прямая соответствует зависимости Холла–Петча.

($\approx G/1000$), $\tilde{k} \approx 26447\,\mathrm{MPa{\cdot}nm^{1/2}}$ (см. данные [20] для Fe) и $v_2 = 0.1$, 0.5 и 1 зависимости $\sigma(d)$, задаваемые формулой (8), приведены на рис. 3, где d варьируется в пределах от 3 до 500 nm. Кривые *1–3* описывают $\sigma(d)$ для $v_2 = 0.1$, 0.5 и 1 соответственно (случай $v_2 = 1$ описывает напряжение течения квазинанокристаллических твердых тел с квазипериодическими границами наклона).

Для $d \approx 3{-}20$ nm и $d > 20$ nm (рис. 3) σ представляет собой напряжение течения соответственно наноструктурных и обычных поликристаллов (с периодическими и квазипериодическими границами). Зависимости $\sigma(d)$ (кривые *1–3*) для различных значений параметра v_2 имеют следующие сходные особенности. Для больших d зависимости $\sigma(d)$ близки к стандартной зависимости Холла–Петча (штриховая прямая на рис. 3). Для малых d зависимости $\sigma(d)$ отклоняются от зависимости Холла–Петча. Подобные отклонения характерны также для экспериментально наблюдаемых (см., обзор [17]) зависимостей механических характеристик (напряжение течения, микротвердость) реальных наноструктурных поликристаллов. Это позволяет заключить, что присутствие квазипериодических границ в наноструктурных поликристаллах способно внести эффективный вклад в экспериментально наблюдаемые отклонения зависимостей между механическими характеристиками и размером зерна от стандартной зависимости Холла–Петча.

Таким образом, геометрия структуры квазипериодических границ зерен, а именно наличие квазипериодического трансляционного порядка обусловливает особенности процессов межзеренного скольжения, протекающих в квазипериодических границах. Так, согласно описанию квазипериодических границ в терминах волн плотности, каждая квазипериодическая граница наряду с обычными трансляционным степенями свободы (гидродинамическими модами) имеет фазонные степени свободы, которые связаны с относительными смещениями соседних кристаллических зерен. Уточнение данного результата в рамках дискретной модели структурных единиц границ зерен свидетельствует, однако, о том, что пространственно однородные относительные смещения соседних зерен осуществляются посредством перестановок структурных единиц квазипериодической границы, характеризуемых ненулевой энергией активации (близкой к энергии активации зернограничной диффузии).

Квазинанокристаллические твердые тела (наноструктурные поликристаллы, содержащие только квазипериодические границы зерен) представляют собой новый (ранее не исследовавшийся) тип наноструктурных материалов со специфическими структурой и свойствами. Реальные наноструктурные поликристаллы, содержащие в общем случае периодические, неупорядоченные и квазипериодические границы, имеют некоторые особенности поведения, сходные с особенностями поведения квазинанокристаллических твердых тел. Так, наличие квазипериодических границ наклона пластифицирует наноструктурные поликристаллы (как и квазинанокристаллические твердые тела) и вносит вклад в экспериментально наблюдаемые отклонения зависимости "напряжение течения– размер зерна" в наноструктурных поликристаллах от стандартной зависимости Холла–Петча.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 95-02-03807).

Список литературы

[1] О.А. Кайбышев, Р.З. Валиев. Границы зерен и свойства металлов. М. (1986). 214 с.
[2] N. Rivier, A.J. Lawrence. Physica **B150**, *2*, 190 (1988).
[3] D. Gratias, A. Thalal. Phil. Mag. Lett. **57**, *2*, 63 (1988).
[4] A.P. Sutton. Acta Metall. **36**, *5*, 1291 (1988).
[5] I.A. Ovid'ko. Mater. Sci. Eng. **A188**, *1/2*, 37 (1994).
[6] I.A. Ovid'ko. Phys. Stat. Sol. (a) **149**, *1*, 389 (1995).
[7] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. IMSP Preprint N 124 (1995).
[8] T.C. Lubensky. In: Introduction to quasicrystals / Ed. M.V. Jaris. Boston etc. (1988). P. 199.
[9] T. Janssen. Phys. Rep. **168**, *2*, 55 (1988).
[10] H. Bohr. Acta Math. **45**, *1*, 29 (1924); **46**, *1*, 101 (1925).
[11] И.А. Овидько. Дефекты в конденсированных средах: стеклах, кристаллах, квазикристаллах, жидких кристаллах, магнетиках, сверхтекучих жидкостях. СПб. (1991). 248 с.
[12] J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt. Phys. Rev. **B34**, *2*, 617 (1986).

[13] H. Gleiter. Acta Cryst. **A24**, *1*, 79 (1991).
[14] V.G. Gryaznov, L.I. Trusov. Progr. Mater. Sci. **37**, *2*, 289 (1993).
[15] H. Gleiter. Nanostruct. Mater. **6**, *1–4*, 3 (1995).
[16] A.E. Romanov. Nanostruct. Mater. **6**, *1–4*, 125 (1995).
[17] R.W. Siegel, G.E. Fougere. Nanostruct. Mater. **6**, *1–4*, 205 (1995).
[18] В.И. Владимиров. Физическая теория прочности и пластичности. Л. (1973). 120 с.
[19] V.G. Gryaznov, M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov, L.I. Trusov. J. Mater. Sci. **28**, *12*, 4359 (1993).
[20] R.W. Armstrong, I. Cold, R.M. Douthwaite, N.I. Petch.. Phil. Mag. **7**, *1*, 45 (1962).