

## Генерация скользящих полупетель расщепленных дислокаций границами зерен в нанокристаллическом Al

© С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько

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

E-mail: gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 2 ноября 2005 г.)

Предложена трехмерная теоретическая модель генерации расщепленных дислокаций границами зерен в нанокристаллическом Al. В рамках модели прямоугольные скользящие полупетли расщепленных дислокаций зарождаются на скользящих петлях решеточных дислокаций, поджатых внешним напряжением к границам зерен. Определены уровень внешнего напряжения и размер зерна, при которых эмиссия таких дислокационных полупетель становится энергетически выгодной. Найдена зависимость ширины дефекта упаковки от размера зерна и величины приложенного напряжения. Показано, что экспериментально наблюдаемые аномально широкие дефекты упаковки в нанокристаллическом Al являются следствием высоких внутренних напряжений, формирующихся на стадиях изготовления и обработки или локального нагружения нанокристаллических образцов.

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, Федерального агентства по науке и инновациям РФ (программа „Механика деформируемого твердого тела и задачи нанотехнологии“ и грант Президента РФ МК-2902.2005.1), программы Министерства образования и науки РФ по развитию научного потенциала высшей школы, программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций“, Офиса морских исследований США (the Office of US Naval Research) (проект N 00014-05-1-0217), Санкт-Петербургского научного центра РАН и Комитета по науке и высшей школе Санкт-Петербурга (грант для молодых кандидатов наук 2005 г.).

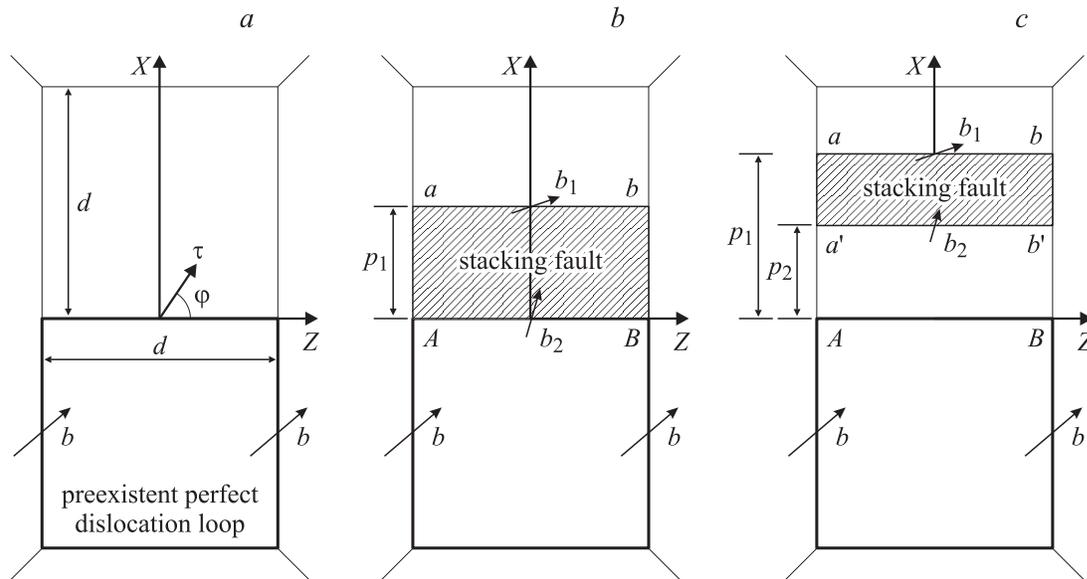
PACS: 62.25.+g, 61.72.Lk, 61.72.Mm

Интенсивные исследования структуры и свойств нанокристаллических металлов — (НКМ) металлов с размером зерна менее 100 nm, — которые проводятся с конца 80-х годов прошлого века, показали значительное превосходство НКМ над металлами в обычном поликристаллическом состоянии. Как правило, НКМ отличаются высокой прочностью [1–3], которой иногда сопутствует достаточно высокая пластичность [1,3]. Некоторые нанокристаллические металлы и сплавы обладают способностью к сверхпластичности [4–8], достижимой при относительно низких температурах и высоких скоростях деформации. По общему мнению, уникальные свойства НКМ являются следствием высокого содержания границ зерен и их тройных стыков, которые играют исключительно важную роль в процессах деформации НКМ [9–17].

В последние годы, благодаря привлечению различных экспериментальных методик, разработке компьютерных и аналитических моделей, был достигнут значительный прогресс в понимании механизмов пластической деформации НКМ. Оказалось, что привычные схемы пластичности обычных металлов здесь либо не работают, либо требуют значительной корректировки с учетом структурных особенностей НКМ. Ярким примером может служить чистый нанокристаллический Al. Проведенное разными группами исследователей компьютерное моделирование методами молекулярной динамики показало, что при очень малых размерах зерен (порядка 5–10 nm)

пластическая деформация нанокристаллического Al осуществляется путем зернограничного проскальзывания и вращения зерен [18,19]. В более крупнозернистом материале, при размере зерна в несколько десятков nm, доминирующим механизмом становится испускание частичных и расщепленных дислокаций из границ зерен [19–23]. Наличие в чистом нанокристаллическом Al частичных дислокаций, широких полос дефекта упаковки и деформационных двойников подтверждено экспериментально [17,24–26]. Дефекты упаковки, образующиеся между частичными дислокациями, оказались в 1.5–11 раз шире, чем в обычных крупнозернистых образцах [26]. Эти наблюдения нарушают устоявшееся мнение о том, что расщепление дислокаций и двойникование в чистом Al практически невозможны из-за высокой энергии дефекта упаковки [27]. По свидетельству авторов [17,28], появление частичных дислокаций Шокли в чистом крупнозернистом Al наблюдалось до сих пор только у вершин трещин [29].

Чтобы понять причины расщепления дислокаций и аномального уширения дефектов упаковки в нанокристаллическом Al, было предложено несколько теоретических моделей [26,28,30,31], описывающих изменение энергии системы в процессе испускания полупетель частичных дислокаций (ППЧД) границами нанозерен. Общим итогом исследования этих моделей стал вывод о том, что главной причиной является малый размер зерна — по мере его уменьшения становится все более



**Рис. 1.** Модель зарождения полупетель частичных дислокаций с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  на исходной петле решеточной дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ :  $a$  — исходная петля, залегающая вдоль границы зерна;  $b$  — зарождение первой полупетли частичной дислокации  $AabB$  на отрезке  $AB$  исходной петли;  $c$  — зарождение второй полупетли частичной дислокации  $Aa'b'B$  на отрезке  $AB$  исходной петли.

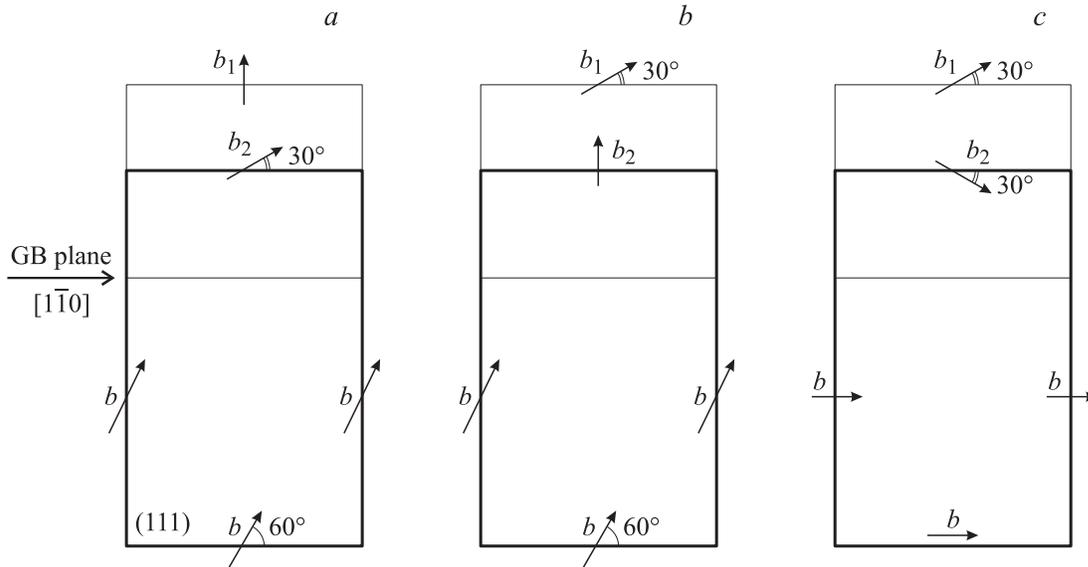
энергетически выгодным уширение дефекта упаковки между последовательно испущенными ППЧД. В то же время общим недостатком моделей [26,28,30,31] был чрезмерно упрощенный метод расчета энергии ППЧД, а также отсутствие учета реальной геометрии их скольжения. В частности, рассматривались полупетли, которые фактически обрывались в упругой среде, не замыкаясь на другие дефекты, хотя предполагалось, что эти обрывы дислокационных линий располагаются на границе зерен. Собственные энергии полупетель рассчитывались как суммы собственных энергий составляющих их отрезков, для вычисления которых использовались погонные упругие энергии бесконечных прямолинейных дислокаций в бесконечной упругой среде с выбором размера зерна в качестве радиуса экранировки. Такой выбор радиуса экранировки обеспечивал грубый учет упругого взаимодействия между отрезками одной полупетли, но взаимодействием между полупетлями при этом пренебрегали. Также использовалось ничем не обоснованное предположение о закреплении и неподвижности первой испущенной ППЧД в процессе испускания второй. В целом такое приближение представляется слишком грубым даже для получения сколько-нибудь надежных качественных результатов, не говоря уже о количественных оценках. Далее будет показано, что оно ведет к принципиальным расхождениям с результатами предлагаемой здесь более корректной модели.

Цель настоящей работы — построение корректной трехмерной модели эмиссии границами зерен полупетель скользящих расцепленных дислокаций в нанокристаллическом Al, основанной на точном расчете энер-

гии упруговзаимодействующих дислокационных петель с учетом реальной геометрии их скольжения. Анализ полученных в рамках этой модели результатов показывает, что размер нанозерна не влияет непосредственно на ширину расщепления дислокации. Определяющую роль играет уровень упругих напряжений, действующих на испускаемые границей полупетли, а нанокристаллическое состояние материала лишь обеспечивает возможность достижения такого уровня.

## 1. Эмиссия границами зерен полупетель расцепленных дислокаций в нанокристаллическом Al. Модель и алгоритм расчета

Рассмотрим модель последовательной эмиссии двух ППЧД границей зерна в нанокристаллическом Al с образованием полос дефектов упаковки между испущенными ППЧД. В исходном состоянии система представляет собой дислокационную петлю с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , которая охватывает зерно целиком, залегая вдоль его границы (рис. 1,  $a$ ). Для простоты предполагается, что зерно и петля имеют квадратную форму. Петля может быть решеточной в случае малоугловой границы или зернограничной в случае большеугловой. Для определенности будем считать ее решеточной. Под действием внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  на одном из отрезков петли происходит последовательное зарождение двух ППЧД с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$ , распро-



**Рис. 2.** Ориентация векторов Бюргера в разных системах скольжения: *a* — система  $60^\circ$ -I; *b* — система  $60^\circ$ -II, *c* — винтовая система.

страняющихся в такое же соседнее зерно. При этом предполагается, что все петли лежат в одной плоскости. На участке между ППЧД образуется дефект упаковки — заштрихованная область на рис. 1, *b, c*. Также будем считать, что  $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ ; этот случай является одним из наиболее благоприятных для зарождения ППЧД и соответствует испусканию петли расщепленной полной дислокации. Комбинация величин  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$ , а также плоскости залегания петель определяют действующую систему скольжения.

Следуя модели [30], рассмотрим три возможные системы скольжения (рис. 2). В двух системах ППЧД зарождаются на отрезке  $60^\circ$  дислокации, причем либо сначала испускается краевой отрезок, а потом  $30^\circ$ -градусный (рис. 2, *a*), либо наоборот (рис. 2, *b*). Будем их называть соответственно системами  $60^\circ$ -I и  $60^\circ$ -II. Если же зарождение происходит на винтовом отрезке исходной петли (рис. 2, *c*), то такую систему будем называть винтовой. Эти названия взяты из работы [30]. Плоскостью скольжения во всех трех случаях служит плоскость (111), а граница зерна, из которой осуществляется эмиссия ППЧД, ориентирована вдоль направления  $[1\bar{1}0]$  (рис. 2, *a*). Векторы Бюргера петель равны [30]: для системы  $60^\circ$ -I — ( $\mathbf{b} = a/2[10\bar{1}]$ ,  $\mathbf{b}_1 = a/6[11\bar{2}]$ ,  $\mathbf{b}_2 = a/6[2\bar{1}\bar{1}]$ ); для  $60^\circ$ -II — ( $\mathbf{b} = a/2[10\bar{1}]$ ,  $\mathbf{b}_1 = a/6[2\bar{1}\bar{1}]$ ,  $\mathbf{b}_2 = a/6[11\bar{2}]$ ); для винтовой — ( $\mathbf{b} = a/2[1\bar{1}0]$ ,  $\mathbf{b}_1 = a/6[2\bar{1}\bar{1}]$ ,  $\mathbf{b}_2 = a/6[1\bar{2}1]$ ). Здесь  $a$  — параметр решетки. Все рассматриваемые петли являются скользящими.

Для анализа процесса испускания ППЧД рассмотрим изменение полной энергии системы. Аналогичный подход использовался при разработке двумерных моделей зарождения частичных дислокаций Шокли на зернограничных краевой дислокации [32] и клиновой дискли-

нации [14], а также трехмерных моделей зарождения различных дислокационных петель на отрезках уже существующих петель [33]. В данном случае, однако, ситуация осложняется тем, что испускаются поочередно две ППЧД, и эти процессы необходимо анализировать отдельно. Кроме того, изменение энергии будет функцией как минимум двух переменных координат  $p_1$  и  $p_2$  скользящих отрезков  $ab$  и  $a'b'$  испущенных ППЧД (рис. 1, *c*). Задача поиска условного минимума функции нескольких переменных достаточно трудоемка. Поэтому использовался следующий алгоритм расчета, который можно разбить на три шага.

(1) На первом шаге вычисляется изменение полной энергии системы  $\Delta W_1^g$  при зарождении первой ППЧД. Если  $\Delta W_1^g \geq 0$ , то для данной системы зарождение ППЧД невыгодно. В противном случае переходим ко второму шагу.

(2) На втором шаге, когда первая ППЧД уже существует и ее скользящий отрезок  $ab$  находится в положении  $p_1$  (рис. 1, *b*), рассматриваются два варианта развития системы: либо отрезок  $ab$  перемещается на некоторое (малое, фиксированное в рамках этого подхода) расстояние  $\delta$ , либо зарождается вторая ППЧД. Для этих двух случаев находим соответствующие изменения полной энергии системы  $\Delta W_1^m(p_1, \delta)$  и  $\Delta W_2^g(p_1)$ . Если  $\Delta W_1^m(p_1, \delta) < \Delta W_2^g(p_1)$  и  $\Delta W_1^m(p_1, \delta) < 0$ , то энергетически более выгодно расширение первой ППЧД, расстояние  $p_1$  получает приращение  $\delta$ , после чего второй шаг повторяется. Если  $\Delta W_2^g(p_1) < \Delta W_1^m(p_1, \delta)$  и  $\Delta W_2^g(p_1) < 0$ , то более выгодно зарождение второй ППЧД, и тогда переходим к третьему шагу расчета. Наконец, случай  $\Delta W_1^m(p_1, \delta) \geq 0$  и  $\Delta W_2^g(p_1) \geq 0$  означает, что система достигла состояния с минимумом энергии, т. е. зарождение второй ППЧД энергетически невыгодно.

(3) На третьем шаге, когда уже испущены обе ППЧД и их скользящие отрезки  $ab$  и  $a'b'$  занимают положения  $p_1$  и  $p_2$  (рис. 1, *c*), ищутся равновесные значения расстояний  $p_1$  и  $p_2$ . Для этого используется итерационная процедура, на каждом шаге которой эти отрезки могут либо остаться на месте, либо сместиться вперед или назад на фиксированное расстояние  $\delta$ . Если отбросить тривиальный случай, когда оба отрезка остаются на месте, получим 8 вариантов развития системы. Для каждого рассчитываются изменения энергии  $\Delta W_2^m(p_1, \delta_1, p_2, \delta_2)$ , где  $\delta_1$  и  $\delta_2$  могут принимать значения из набора  $(-\delta, 0, +\delta)$ . На самом деле вариантов может быть меньше, так как учитываются следующие ограничения на координаты отрезков  $ab$  и  $a'b'$ : отрезки не могут покинуть зерно, второй отрезок не может опередить первый, отрезки не могут сблизиться на расстояние, меньшее суммы радиусов их ядер. Координаты отрезков получают приращения  $\delta_1$  и  $\delta_2$ , соответствующие наименьшей из величин  $\Delta W_2^m(p_1, \delta_1, p_2, \delta_2)$ , после чего происходит переход к следующей итерации. Процедура повторяется до тех пор, пока все величины из набора  $\Delta W_2^m(p_1, \delta_1, p_2, \delta_2)$ , соответствующие всем возможным перемещениям отрезков ППЧД, на станут положительными. Это будет означать, что система достигла минимума энергии, и текущие положения отрезков  $p_1$  и  $p_2$  являются равновесными.

Описанная модель и алгоритм ее исследования имеют преимущество перед предыдущими моделями [26,28,30,31], поскольку позволяют проследить весь процесс генерации и расширения двух ППЧД с момента зарождения первой из них. По существу, этот подход дает описание эмиссии петли расщепленной полной дислокации со всеми деталями ее расширения. Предложенный алгоритм легко реализуется в виде компьютерной программы. В настоящей работе расчеты выполнялись в среде Mathematica 4.

## 2. Энергетика зарождения и расширения полупетель частичных дислокаций

Рассмотрим подробно процесс зарождения и расширения ППЧД и рассчитаем изменения энергии системы  $\Delta W_1^s, \Delta W_1^m(p_1, \delta), \Delta W_2^s(p_1), \Delta W_2^m(p_1, \delta_1, p_2, \delta_2)$ .

В исходном состоянии (рис. 1, *a*) имеется квадратная скользящая дислокационная петля размером  $d$  ( $d$  — также размер зерна) с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  ( $b$ -петля). Энергия  $W_0$  такой системы состоит из собственной упругой энергии петли  $W_s$  и энергии ядер составляющих ее дислокационных отрезков  $W_c$ .

$$W_0 = W_s + W_c. \quad (1)$$

Генерация первой ППЧД осуществляется путем расщепления одного из отрезков  $\mathbf{b}$ -петли с образова-

нием неподвижного отрезка  $AB$  с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_2 = \mathbf{b} - \mathbf{b}_1$  и скользящего отрезка  $ab$  с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_1$ . Эти отрезки соединяются перпендикулярными им отрезками  $Aa$  и  $Bb$  с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  (рис. 1, *b*). Таким образом, система после испускания первой ППЧД может быть представлена в виде двух прямоугольных скользящих дислокационных петель с одним общим отрезком  $AB$  (рис. 1, *b*): исходной  $\mathbf{b}$ -петли и новой петли с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и размерами  $d \times p_1$  ( $b_1$ -петли), где  $p_1$  — координата скользящего отрезка  $ab$   $b_1$ -петли. Внутри  $b_1$ -петли формируется дефект упаковки (заштрихованная область на рис. 1, *b*). Полная энергия такой системы является функцией  $p_1$  и может быть записана в виде

$$W_1(p_1) = W_s + W_{s1}(p_1) + W_{int1}(p_1) + W'_c + W'_{c1}(p_1) + W_{c2} + W_{f1}(p_1), \quad (2)$$

где  $W_s, W_{s1}(p_1)$  — соответственно собственные упругие энергии  $b$ - и  $b_1$ -петель,  $W_{int1}(p_1)$  — энергия их упругого взаимодействия,  $W'_c$  — энергия ядер тех трех отрезков  $b$ -петли, которые остаются неизменными при испускании  $b_1$ -петли,  $W'_{c1}(p_1)$  — энергия ядер сегментов  $Aa, ab$  и  $Bb$   $b_1$ -петли,  $W_{c2}$  — энергия ядра неподвижного сегмента  $AB$  с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_2$ ,  $W_{f1}(p_1)$  — энергия дефекта упаковки.

На первом шаге работы программы необходимо вычислить изменение энергии  $\Delta W_1^s$  в результате зарождения первой ППЧД. При этом состояние системы сразу после образования ППЧД, когда образовавшиеся в результате расщепления дислокации располагаются очень близко друг к другу, не может быть описано в рамках линейной теории упругости. Поэтому в работе сделано допущение, что сразу после своего зарождения скользящий сегмент  $ab$  оказывается на расстоянии  $p_1 = p_0 = 1 \text{ nm}$  от неподвижного сегмента  $AB$ . С одной стороны, это расстояние достаточно велико, чтобы можно было пользоваться формулами линейной теории упругости. С другой стороны, в данном случае речь идет не просто о расщеплении, а об испускании дислокации из границы, которая сама имеет конечную толщину порядка  $1 \text{ nm}$  в НКМ [9–12]. Естественно полагать, что исходная позиция образовавшейся частичной дислокации находится за пределами границы зерна, так что сделанное допущение имеет ясный физический смысл. С учетом этого разность энергий  $\Delta W_1^s$  записывается с помощью формул (1) и (2) в виде

$$\begin{aligned} \Delta W_1^s &= W_1(p_0) - W_0 - A_1(p_0) \\ &= W_{s1}(p_0) + W_{int1}(p_0) + (W'_c - W_c) + W'_{c1}(p_0) \\ &\quad + W_{c2} + W_{f1}(p_0) - A_1(p_0), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $A_1(x)$  — работа внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  по смещению скользящего отрезка  $ab$  на расстояние  $x$ .

В свою очередь изменение энергии  $\Delta W_1^m(p_1, \delta)$ , связанное с перемещением отрезка  $ab$  на расстояние  $\delta$ , можно записать, используя формулу (2), как

$$\begin{aligned} \Delta W_1^m(p_1, \delta) &= W_1(p_1 + \delta) - W_1(p_1) - A_1(\delta) \\ &= W_{s1}(p_1 + \delta) - W_{s1}(p_1) + W_{\text{int}1}(p_1 + \delta) \\ &\quad - W_{\text{int}1}(p_1) + W'_{c1}(p_1 + \delta) - W'_{c1}(p_1) \\ &\quad + W_{f1}(p_1 + \delta) - W_{f1}(p_1) - A_1(\delta). \end{aligned} \quad (4)$$

Аналогично генерация второй ППЧД осуществляется в результате расщепления неподвижного отрезка  $AB$ , возникшего после испускания первой ППЧД. Здесь, однако, из-за предположения  $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$  реализуется частный случай, когда изначально неподвижный отрезок  $AB$  сам начинает перемещаться под действием внешнего напряжения, превращаясь в новый отрезок  $a'b'$  (рис. 1, c). При этом формируются перпендикулярные дислокационные отрезки  $Aa'$  и  $Bb'$  с вектором Бюргера  $\mathbf{b}$ , соединяющие новый отрезок  $a'b'$  с тройными стыками  $A$  и  $B$ . Новую дефектную структуру можно представить в виде трех дислокационных петель: исходной  $b$ -петли и двух петель частичных дислокаций  $AabB$  и  $Aa'b'B$  соответственно с векторами Бюргера  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  ( $b_1$ - и  $b_2$ -петель). Полную энергию  $W_2$  такой системы с координатами скользящих отрезков  $ab$  и  $a'b'$  соответственно  $p_1$  и  $p_2$  (рис. 1, c) можно представить в виде

$$\begin{aligned} W_2(p_1, p_2) &= W_s + W_{s1}(p_1) + W_{s2}(p_2) \\ &\quad + W_{\text{int}1}(p_1) + W_{\text{int}2}(p_2) + W_{\text{int}3}(p_1, p_2) \\ &\quad + W'_c + W'_{c1}(p_1, p_2) + W_{c2} \\ &\quad + W_{c3}(p_2) + W_{f2}(p_1, p_2), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $W_{s2}(p_2)$  — собственная упругая энергия  $b_2$ -петли;  $W_{\text{int}2}(p_2)$  — энергия упругого взаимодействия  $b$ - и  $b_2$ -петель;  $W_{\text{int}3}(p_1, p_2)$  — энергия упругого взаимодействия  $b_1$ - и  $b_2$ -петель;  $W'_{c1}(p_1, p_2)$  — энергия ядер дислокационных отрезков  $a'a$ ,  $ab$  и  $bb'$ ;  $W_{c3}(p_2)$  — энергия ядер отрезков  $Aa'$  и  $Bb'$ ;  $W_{f2}(p_1, p_2)$  — энергия дефекта упаковки в области  $abb'a'$ .

Используя выражение (5), запишем введенные в предыдущем разделе изменения энергии  $\Delta W_2^g(p_1)$ ,  $\Delta W_2^m(p_1, \delta_1, p_2, \delta_2)$

$$\begin{aligned} \Delta W_2^g(p_1) &= W_2(p_1, p_0) - W_1(p_1) - A_2(p_0) \\ &= W_{s2}(p_0) + W_{\text{int}2}(p_0) + W_{\text{int}3}(p_1, p_0) \\ &\quad + W'_{c1}(p_1, p_0) - W'_{c1}(p_1) + W_{c3}(p_0) \\ &\quad + W_{f2}(p_1, p_0) - W_{f1}(p_1) - A_2(p_0), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Delta W_2^m(p_1, \delta_1, p_2, \delta_2) &= W_2(p_1 + \delta_1, p_2 + \delta_2) \\ &\quad - W_2(p_1, p_2) - A_1(\delta_1) - A_2(\delta_2) = W_{s1}(p_1 + \delta_1) \\ &\quad - W_{s1}(p_1) + W_{s2}(p_2 + \delta_2) - W_{s2}(p_2) + W_{\text{int}1}(p_1 + \delta_1) \\ &\quad - W_{\text{int}1}(p_1) + W_{\text{int}2}(p_2 + \delta_2) - W_{\text{int}2}(p_2) \\ &\quad + W_{\text{int}3}(p_1 + \delta_1, p_2 + \delta_2) - W_{\text{int}3}(p_1, p_2) \\ &\quad + W'_{c1}(p_1 + \delta_1, p_2 + \delta_2) - W'_{c1}(p_1, p_2) + W_{c3}(p_2 + \delta_2) \\ &\quad - W_{c3}(p_2) + W_{f2}(p_1 + \delta_1, p_2 + \delta_2) - W_{f2}(p_1, p_2). \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь  $A_2(x)$  — работа внешнего сдвигового напряжения  $\tau$  по смещению отрезка  $a'b'$  на расстояние  $x$ .

Рассмотрим слагаемые в правых частях выражений (3), (4), (6) и (7). Собственная упругая энергия прямоугольной скользящей дислокационной петли была найдена в работе [34], согласно которой слагаемые  $W_{si}(p_i)$  ( $i = 1, 2$ ) могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} W_{si}(p_i) &= Db_i^2 \left\{ (2 - \nu)(h_i - p_i - d) \right. \\ &\quad + (1 - \nu \sin^2 \alpha_i) d \ln \frac{2p_i d}{r_{ci}(h_i + d)} \\ &\quad \left. + (1 - \nu \cos^2 \alpha_i) p_i \ln \frac{2p_i d}{r_{ci}(h_i + p_i)} \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$ ,  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $h_i^2 = p_i^2 + d^2$ ,  $\alpha_i$  — угол между вектором Бюргера  $\mathbf{b}_i$  и осью  $x$ ,  $r_{ci}$  — радиус ядра частичной дислокации. Энергия взаимодействия между дислокационными петлями может быть рассчитана обычным способом, как работа по зарождению одной петли в поле напряжений другой [35]. Так, энергии взаимодействия  $W_{\text{int}1}(p_1)$  и  $W_{\text{int}2}(p_2)$  находятся по формуле

$$\begin{aligned} W_{\text{int}i}(p_i) &= -b_i \int_{r_c}^{p_i} dx \int_{-d/2}^{d/2} dz [\cos \alpha_i \sigma_{xy}^b(x, y = 0, z) \\ &\quad + \sin \alpha_i \sigma_{yz}^b(x, y = 0, z)], \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь  $r_c$  — радиус ядра  $b$ -петли, а  $\sigma_{xy}^b$  и  $\sigma_{yz}^b$  — компоненты ее поля напряжений, которые определяются выражениями [36]

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^b &= \frac{Db}{2\rho} \left[ \frac{uv \cos \alpha}{v^2 + y^2} \left( -1 + \frac{y^2}{\rho^2} + \frac{2y^2}{v^2 + y^2} \right) \right. \\ &\quad \left. - (1 - \nu) \frac{v^2 + y^2}{u^2 + y^2} \right] \Big|_{z'=-d/2}^{z'=d/2} \Big|_{x'=-d}^{x'=0}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\alpha_{yz}^b = \frac{Db}{2\rho} \left[ \cos \alpha \left( v - \frac{y^2}{\rho^2} \right) + \frac{uv \sin \alpha}{u^2 + y^2} \left( -1 + \frac{y^2}{\rho^2} \right) + \frac{2y^2}{u^2 + y^2} - (1 - v) \frac{u^2 + y^2}{v^2 + y^2} \right] \Big|_{z'=-d/2}^{z'=d/2} \Big|_{x'=-d}^{x'=0}, \quad (11)$$

где  $\alpha$  — угол между вектором  $\mathbf{b}$  и осью  $x$ ,  $v = x - x'$ ,  $u = z - z'$ ,  $\rho^2 = v^2 + u^2 + y^2$  и использована схема записи  $f(t)|_{t=a}^{t=b} = f(b) - f(a)$ . Подстановка (10) и (11) в формулу (9) после интегрирования дает

$$\begin{aligned} W_{\text{int}i}(p_i) = & -Db b_i \left[ (2 - v) \cos(\alpha - \alpha_i) ((\sqrt{2} - 1)d + h_i - R_i) + d(\cos(\alpha - \alpha_i) - v \sin \alpha \sin \alpha_i) \right. \\ & \times \ln \frac{2dp_i(d + R_i)}{(\sqrt{2} + 1)r_c(d + p_i)(d + h_i)} + (\cos(\alpha - \alpha_i) - v \cos \alpha \cos \alpha_i) \left( d \ln \frac{(d + p_i + R_i)}{(\sqrt{2} + 1)(d + p_i)} \right. \\ & \left. \left. + p_i \ln \frac{p_i(d + p_i + R_i)}{(p_i + h_i)(d + p_i)} \right) \right], \quad (12) \end{aligned}$$

где  $R_i^2 = d^2 + (d + p_i)^2$ .

Энергия взаимодействия  $W_{\text{int}3}(p_1, p_2)$  рассчитывается аналогично,

$$\begin{aligned} W_{\text{int}3}(p_1, p_2) = & -b_2 \int_{r_{c1}}^{p_2} dx \int_{-d/2}^{d/2} dz [\cos \alpha_i \sigma_{xy}^{b_1}(x, y = 0, z) + \sin \alpha_i \sigma_{yz}^{b_1}(x, y = 0, z)] = Db_1 b_2 \left[ (2 - v) \cos(\alpha_1 - \alpha_2) \right. \\ & \times (h_1 + h_2 - S - d - 2p_2) + d(\cos(\alpha_1 - \alpha_2) - v \sin \alpha_1 \sin \alpha_2) \ln \frac{2dp_1 p_2 (d + S)}{r_{c1}(p_1 - p_2)(d + h_1)(d + h_2)} \\ & + (\cos(\alpha_1 - \alpha_2) - v \cos \alpha_1 \cos \alpha_2) \times \left( p_1 \ln \frac{p_1(p_1 - p_2 + S)}{(p_1 - p_2)(p_1 + h_1)} + p_2 \right. \\ & \left. \times \ln \frac{4d(p_1 - p_2)p_2}{r_{c1}^2(p_1 - p_2 + S)(p_2 + h_2)} \right) \Big], \quad (13) \end{aligned}$$

где  $S^2 = d^2 + (p_1 - p_2)^2$ , а  $\sigma_{xy}^{b_1}$  и  $\sigma_{yz}^{b_1}$  — компоненты тензора напряжений  $b_1$ -петли, которые задаются выражениями (10) и (11) с заменой  $b$  на  $b_1$  и  $|_{x'=-d}^{x'=0}$  на  $|_{x'=0}^{x'=p_1}$ .

Энергии ядер определяются стандартными приближенными формулами [37]

$$W'_c - W_c = -Db^2 \frac{d}{2} (1 - v \sin^2 \alpha), \quad (14)$$

$$\begin{aligned} W'_{c1}(p_1) = & Db_1^2 \left[ \frac{d}{2} (1 - v \sin^2 \alpha_1) + (p_1 - b_1) \right. \\ & \left. \times (1 - v \cos^2 \alpha_1) \right], \quad (15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W''_{c1}(p_1, p_2) = & Db_1^2 \left[ \frac{d}{2} (1 - v \sin^2 \alpha_1) \right. \\ & \left. + (p_1 - p_2 - b_1)(1 - v \cos^2 \alpha_1) \right], \quad (16) \end{aligned}$$

$$W_{c2} = Db_2^2 \frac{d}{2} (1 - v \sin^2 \alpha_2), \quad (17)$$

$$W_{c3}(p_2) = Db^2 (p_2 - b_2)(1 - v \cos^2 \alpha_2). \quad (18)$$

Энергии дефектов упаковки  $W_{f1}(p_1)$  и  $W_{f2}(p_1, p_2)$  в системах на рис. 1, *b* и *c* соответственно равны

$$W_{f1}(p_1) = \gamma(d - 2b_1)(p_1 - r_{c1} - r_{c2}), \quad (19)$$

$$W_{f2}(p_1, p_2) = \gamma(d - 2b_1)(p_1 - p_2 - r_{c1} - r_{c2}), \quad (20)$$

где  $\gamma$  — удельная энергия дефекта упаковки. Работа внешнего напряжения  $\tau$  по перемещению скользящих отрезков  $ab$  и  $a'b'$  (рис. 1, *c*) рассчитывается как

$$A_i(p_i) = \tau b_i p_i d \sin(\alpha_i + \varphi). \quad (21)$$

Таким образом, найдены все слагаемые в правых частях выражений (3), (4), (6) и (7) для величин  $\Delta W_1^g$ ,  $\Delta W_1^m(p_1, \delta)$ ,  $\Delta W_2^g(p_1)$ ,  $\Delta W_2^m(p_1, \delta_1, p_2, \delta_2)$ . Следует отметить один важный момент, касающийся расчета величин  $\Delta W_1^g$  и  $\Delta W_2^g(p_1)$ , т.е. изменений энергии, связанных с зарождением ППЧД. При зарождении новой дислокации система преодолевает энергетический барьер, чему способствуют термофлуктуации. Для их учета энергетический барьер понижался на величину  $n k_B T$ , равную тепловой энергии атомов кристаллической решетки. Здесь  $n$  — число атомов на фронте зарождающейся петли ( $n \approx d/a$ ,  $a$  — межатомное расстояние),  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура. Для определенности считалось, что  $T = 300$  К.

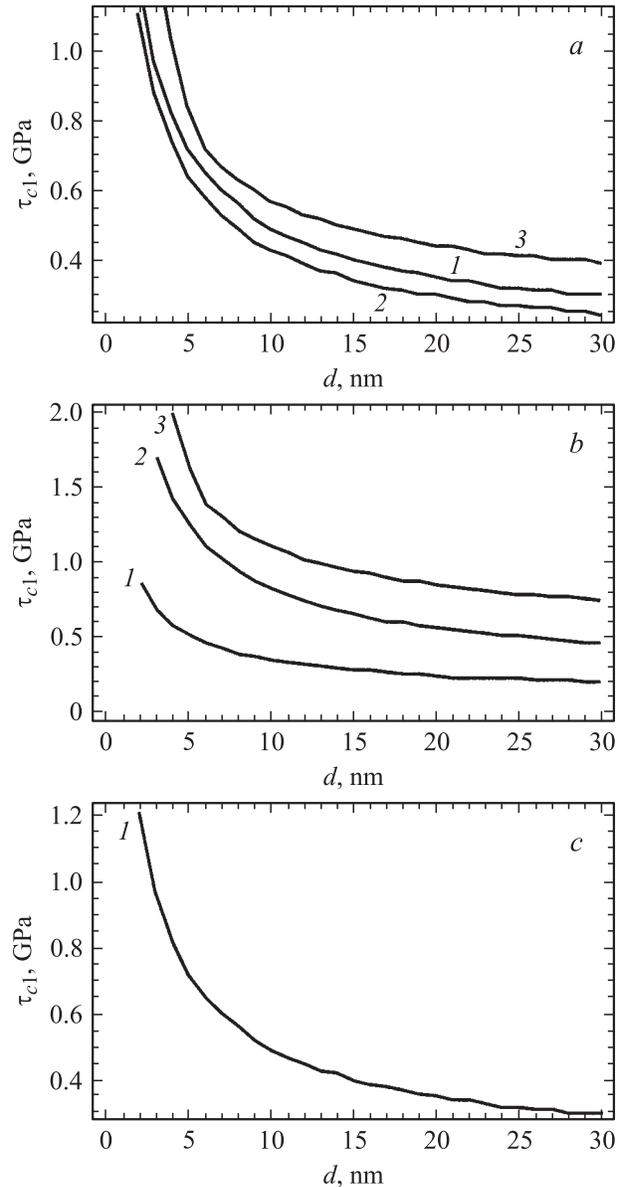
### 3. Результаты расчетов и их обсуждение

Расчеты по изложенному в разделе 1 алгоритму выполнялись для нанокристаллического Al. Использовались следующие типичные значения параметров материала [30]: постоянная решетки  $a = 0.404$  нм, упругие модули  $G = 26.5$  ГПа,  $v = 0.345$ , удельная энергия дефекта упаковки  $\gamma = 122$  мДж/м<sup>2</sup>. Также полагалось, что  $r_c = b$ ,  $r_{ci} = b_i$  ( $i = 1, 2$ ),  $\delta = 0.01$  нм. В процессе расчета для каждой системы скольжения при заданных размере зерна  $d$ , уровне внешнего напряжения  $\tau$  и его ориентации  $\varphi$  определялась равновесная конфигурация системы, т.е. равновесные координаты  $p_1$  и  $p_2$  (рис. 1). Вычисления проводились в диапазоне изменения  $d$  от 2 до 30 нм

с шагом 1 nm и  $\tau$  от 0 до 2 GPa с шагом 0.01 GPa для трех вариантов ориентации  $\tau$ :  $\varphi = 45, 90$  и  $135^\circ$ . Во всех рассматриваемых системах скольжения векторы Бюргера дислокаций имели одинаковую величину  $b = a/\sqrt{2}$ ,  $b_1 = b_2 = a/\sqrt{6}$ , но разное направление [30]: в системе  $60^\circ$ -I —  $\alpha = 30^\circ$ ,  $\alpha_1 = 0$ ,  $\alpha_2 = 60^\circ$ , в системе  $60^\circ$ -II —  $\alpha = 30^\circ$ ,  $\alpha_1 = 60^\circ$ ,  $\alpha_2 = 0$ , в винтовой системе —  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\alpha_1 = 60^\circ$ ,  $\alpha_2 = 120^\circ$ .

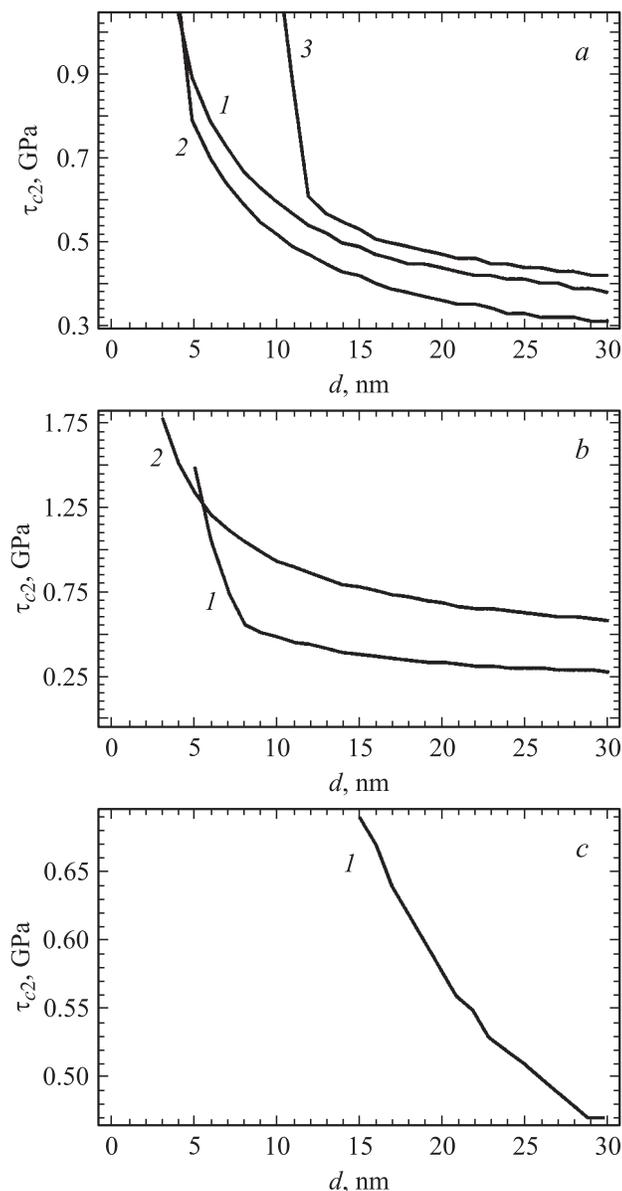
В результате расчетов была получена таблица равновесных координат  $p_1$  и  $p_2$  дислокационных отрезков  $ab$  и  $a'b'$  для заданного набора параметров задачи. Практический интерес представляют критические уровни напряжения  $\tau$ , при превышении которых система совершает переход в новое состояние. Рассматривалось два критических напряжения:  $\tau_{c1}$  — напряжение, при котором испускается первая ППЧД, и  $\tau_{c2}$  — напряжение, при котором испускается вторая ППЧД.

Определение этих критических напряжений заслуживает отдельного комментария. Если строго следовать формулам, выведенным в предыдущем разделе, то изменение энергии системы  $\Delta W_1^s$  при зарождении первой ППЧД отрицательно практически при любых значениях параметров задачи (исключение составляют случаи очень малых размеров зерен  $d < 5$  nm и неблагоприятной ориентации  $\varphi$ , когда  $\tau$  вынуждает отрезок  $ab$  двигаться обратно к границе, как, например, в винтовой системе (рис. 2, *c*) при  $\varphi = 135^\circ$ ). Это означает, что исходный отрезок  $AB$  должен практически всегда расщепляться с образованием ППЧД. Такой результат полностью согласуется с результатами работы [33], в которой детально исследовано зарождение петель дислокаций различных типов на изначально существующих дислокационных петлях и показано, что зарождение петли частичной дислокации на петле полной осуществляется безбарьерным путем. Поэтому определение  $\tau_{c1}$  как напряжения, при котором становится выгодным расщепление исходной дислокации, дало бы  $\tau_{c1} = 0$  практически при любых значениях параметров задачи. Очевидно, что определенное таким образом критическое напряжение не имеет особого смысла. Поэтому  $\tau_{c1}$  определялось иначе. Расчеты показали, что после расщепления исходного отрезка  $AB$  при относительно малых  $\tau$  новый отрезок  $ab$  остается неподвижным, так как его движению препятствует увеличение ширины (и энергии) дефекта упаковки. Отрезок  $ab$  остается тесно связанным с границей, на которой он зародился до того момента, пока  $\tau$  не достигнет определенной величины. В этих условиях нельзя говорить об „испускании“ дислокации, поскольку она практически неотделима от границы. Таким образом, имеет смысл определить критическое напряжение  $\tau_{c1}$  как напряжение, при котором отрезок  $ab$  начнет смещаться со своей исходной позиции  $p_1 = p_0 = 1$  nm. На основе такого определения на рис. 3 построены зависимости  $\tau_{c1}(d)$  для всех рассматриваемых систем скольжения и трех ориентаций внешнего напряжения ( $\varphi = 45, 90$  и  $135^\circ$ ).



**Рис. 3.** Зависимость критического напряжения  $\tau_{c1}$ , при превышении которого становится выгодным испускание первой полупетли частичной дислокации, от размера зерна  $d$  для различных дислокационных систем (1 — система  $60^\circ$ -I, 2 — система  $60^\circ$ -II, 3 — винтовая система) и трех ориентаций  $\varphi$  внешнего напряжения:  $\varphi = 45$  (a),  $90$  (b) и  $135^\circ$  (c). Для случая *c* испускание первой частичной дислокации реализуется только в системе  $60^\circ$ -I.

Указанное относится и к процессу испускания второй ППЧД. Из-за условия  $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$  эмиссия второй ППЧД представляет собой уже не расщепление отрезка разностной дислокации  $AB$ , а его переход из границы в тело зерна с превращением в отрезок  $a'b'$ . При этом его исходная позиция оказывается не в теле зерна, а непосредственно в границе ( $p_2 = 0$ ). Тогда второе критическое напряжение  $\tau_{c2}$  определяется аналогично первому, как напряжение, при котором отрезок  $a'b'$  второй



**Рис. 4.** Зависимость критического напряжения  $\tau_{c2}$ , при превышении которого становится выгодным испускание второй полупетли частичной дислокации, от размера зерна  $d$  для различных дислокационных систем (1 — система 60°-I, 2 — система 60°-II, 3 — винтовая система) и трех ориентаций  $\varphi$  внешнего напряжения:  $\varphi = 45^\circ$  (a),  $90^\circ$  (b) и  $135^\circ$  (c). В случае b в винтовой системе не наблюдается формирование второй частичной дислокации, а в случае c вторая частичная дислокация испускается только в системе 60°-I.

ППЧД начинает смещаться из начального положения  $p_2 = 0$ . На рис. 4 приведены графики зависимостей  $\tau_{c2}(d)$  для всех рассматриваемых систем скольжения и трех ориентаций внешнего напряжения ( $\varphi = 45^\circ, 90^\circ$  и  $135^\circ$ ).

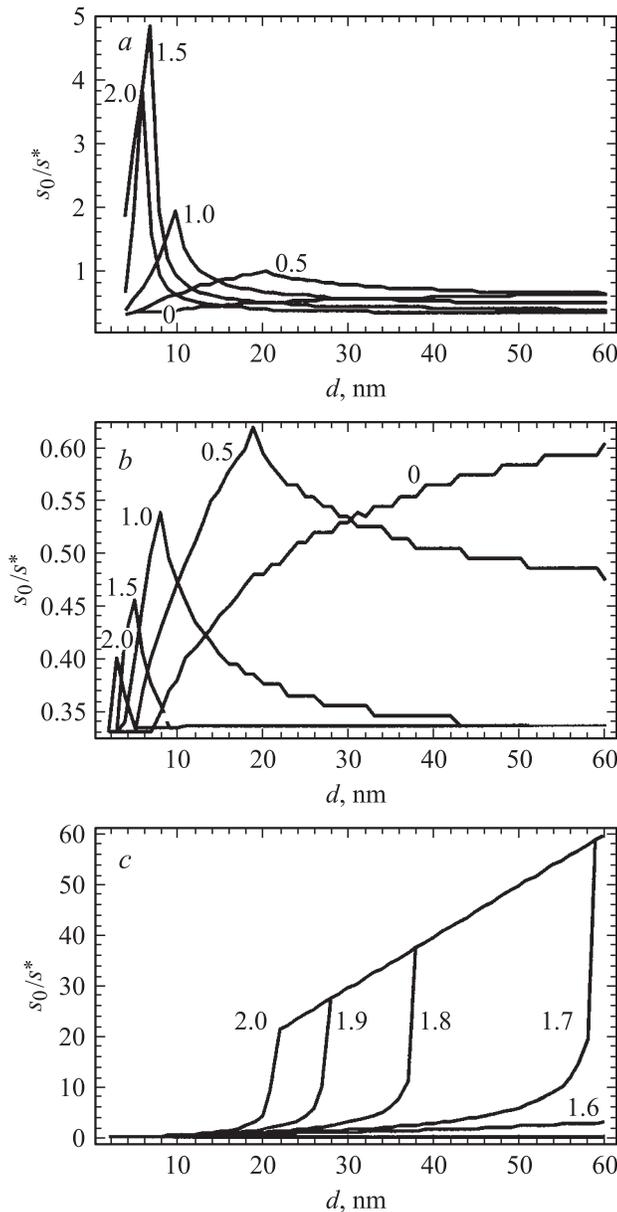
В целом из зависимостей на рис. 3 и 4 можно сделать вывод, что дислокации, принадлежащие винтовой системе (кривые 3), должны реже наблюдаться на

практике, так как критические напряжения для этой системы максимальны. Наиболее вероятно зарождение дислокаций, формирующих систему 60°-I, поскольку в общем случае критические напряжения для этой системы (кривые 1) ниже остальных (исключение составляют ориентации  $\varphi$ , близкие к  $45^\circ$ , когда вероятнее образование системы 60°-II, кривые 2). Эти выводы полностью согласуются с результатами [30]. Также видно, что при ориентации  $\varphi = 135^\circ$  в системе 60°-II и винтовой системе эмиссия ППЧД вообще не осуществляется — внешнее напряжение  $\tau$  в этих случаях препятствует их испусканию.

В настоящей работе исследовалась также зависимость равновесной ширины дефекта упаковки от размера зерна  $d$  и внешнего напряжения  $\tau$  в нанокристаллическом Al. Для этого использовался последний шаг изложенного в разделе 1 алгоритма — обе ППЧД помещались в тело зерна, после чего системе позволялось релаксировать под действием  $\tau$ . Равновесная ширина дефекта упаковки  $s_0$  тогда определяется как  $s_0 = p_1 - p_2$ , где  $p_1$  и  $p_2$  — равновесные положения скользящих сегментов  $ab$  и  $a'b'$  (рис. 1, c). Она сравнивалась с известной равновесной шириной дефекта упаковки  $s^* = Gb_1^2/[4\pi\gamma(1-\nu)]$  между прямолинейными частичными дислокациями в бесконечной среде [37] (для Al имеем  $s^* = 0.7$  nm). На рис. 5 представлены зависимости отношения  $s_0/s^*$  от размера зерна  $d$  для всех рассмотренных систем скольжения при разных уровнях внешнего напряжения  $\tau$ , ориентированного под углом  $\varphi = 90^\circ$ .

Сразу обращает на себя внимание сильная зависимость результатов от геометрии системы скольжения. Для системы скольжения 60°-I (рис. 5, a) и винтовой системы (рис. 5, c) возможно формирование широких дефектов упаковки. Например, в винтовой системе при  $d > 20$  nm и очень высоких напряжениях  $\tau \approx 1.7 \dots 2$  GPa дефект упаковки пересекает все зерно — этот момент определяется изломом кривой и ее выходом на линейный участок, где  $s_0(d) = d$  (рис. 5, c). Напротив, в системе 60°-II (рис. 5, b) дефект упаковки оказывается уже, чем между прямолинейными дислокациями в бесконечной среде ( $s_0 < s^*$ ). Эти различия объясняются разными ориентациями векторов Бюргера  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  по отношению к приложенному напряжению  $\tau$ .

Сравним полученные результаты с данными экспериментальных наблюдений [24,26] на образцах нанокристаллического Al с размером зерна  $d < 100$  nm, полученных путем криогенного размора в шаровой мельнице с последующим прессованием, т.е. путем интенсивной пластической деформации, формирующей высокие упругие напряжения в готовых образцах. По свидетельству авторов [24,26], расцепленные дислокации в большинстве случаев относились к винтовой системе, реже наблюдалось расщепление 60° дислокаций. Ширина расщепления составляла от 1.4 до 6.8 nm, что по сравнению с известной экспериментальной величиной



**Рис. 5.** Зависимость отношения равновесной ширины  $s_0$  дефекта упаковки в нанозерне к его ширине  $s^*$  в бесконечной среде от размера зерна  $d$  при разных уровнях внешнего напряжения  $\tau$  (показанных в единицах ГПа у соответствующих кривых) для трех систем скольжения:  $60^\circ$ -I (a),  $60^\circ$ -II (b) и винтовая система (c). Все кривые построены для ориентации внешнего напряжения  $\varphi = 90^\circ$ .

$s_{\text{exp}}^* \approx 0.55$  nm для расщепления  $60^\circ$  дислокаций в монокристаллах Al давало прирост в 1.5...11 раз [26]. При этом дефекты упаковки фиксировались в относительно мелких равноосных зернах с размером порядка 50 nm или в вытянутых зернах такой же толщины. В последнем случае они были ориентированы поперек вытянутого зерна. В плоскостях скольжения, ориентированных вдоль вытянутых зерен длиной порядка 150 nm, наблюдались полные нерасщепленные дислокации. Таким

образом, появление расщепленных дислокаций наблюдалось только в тех случаях, когда оказывалась невозможной релаксация напряжений за счет скольжения полных дислокаций.

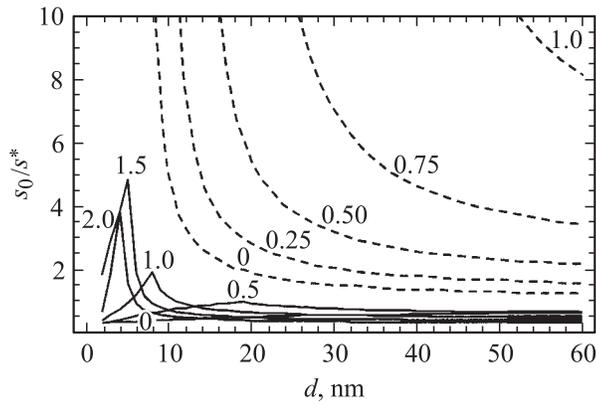
Полученные в настоящей работе численные результаты для системы скольжения  $60^\circ$ -I ( $s_0/s^* \leq 7$  на рис. 5, a) вполне укладываются в экспериментально наблюдаемый диапазон отношения  $s_0/s_{\text{exp}}^* \approx 1.5 \dots 11$  [26]. При этом в области больших  $d$  уширение дефекта упаковки становится наибольшим ( $s_0/s^* \approx 1.1 \dots 1.5$ ) при относительно низком уровне  $\tau = 0.5$  ГПа (напряжения такого порядка величины считаются нормой для образцов, полученных указанным способом [24]). Такое слабое уширение согласуется с замечанием авторов [24,26] о редких случаях расщепления  $60^\circ$  дислокаций. Вероятно, эти редкие случаи относились либо к значительно более мелким зернам, либо к участкам вблизи тройных стыков более крупных зерен. Как показывают расчеты, в таких ситуациях (при  $d \approx 5 \dots 10$  nm) должно наблюдаться существенное расщепление  $60^\circ$  дислокаций (рис. 5, a), которое требует и более высокого уровня напряжения  $\tau$  порядка 1...1.5 ГПа.

Для винтовой системы в области больших  $d$  (рис. 5, c), как уже отмечалось, возможно формирование очень широких дефектов упаковки  $s_0/s^* > 10$ , вплоть до пересечения ими всего зерна. Однако, как показано на рис. 4, b, в винтовой системе для случая  $\varphi = 90^\circ$  невозможно зарождение второй ППЧД. При меньших  $\varphi$  это возможно, но требует достаточно высоких напряжений (рис. 4, a). Экспериментальные наблюдения множественных расщеплений винтовых дислокаций в работах [24,26] указывают, таким образом, на высокий уровень упругих напряжений в исследованных образцах.

Сравнивая результаты настоящей работы с результатами теоретических моделей [26,28,30,31], можно видеть ряд принципиальных отличий. Для системы  $60^\circ$ -I в работе [30] была получена следующая формула:

$$s_0(d)/s^* = \frac{\gamma}{\gamma - \frac{Ga^2(8-5\nu)}{48\pi(1-\nu)d} \ln \frac{\sqrt{2}d}{a} - \frac{\tau a}{2} \left( \frac{\sin \varphi}{\sqrt{6}} - \frac{\cos \varphi}{\sqrt{2}} \right)}. \quad (22)$$

Зависимости подобного типа типичны и для прочих систем скольжения, рассмотренных в [30], а также для моделей [26,28,31]. На рис. 6 для сравнения приведены штриховые кривые  $s_0(d)/s^*$ , построенные по формуле (22), и сплошные кривые, полученные для системы  $60^\circ$ -I в настоящей модели. Видно, что первые совершенно отличаются от вторых. То же самое можно сказать и о результатах для остальных систем скольжения (рис. 5, b, c). Главное общее отличие состоит в том, что для всех трех систем скольжения в отсутствие внешнего напряжения ( $\tau = 0$ ) дефект упаковки в настоящей модели оказывается уже, чем в бесконечной среде  $s_0/s^* < 1$ , тогда как предыдущие теоретические модели [26,28,30,31] дают противоположный результат. При ненулевых значениях  $\tau$  сплошные кривые  $s_0(d)/s^*$  имеют ярко выраженный максимум в виде острого пика,



**Рис. 6.** Зависимость отношения равновесной ширины  $s_0$  дефекта упаковки в нанозерне к его ширине  $s^*$  в бесконечной среде от размера зерна  $d$  при разных уровнях внешнего напряжения  $\tau$  (показанных в единицах GPa у соответствующих кривых) для системы скольжения  $60^\circ$ -I в настоящей модели (сплошные линии) и модели [30] (штриховые линии).

в то время как штриховые кривые  $s_0(d)/s^*$  монотонно убывают с ростом  $d$ . Чем выше уровень  $\tau$ , тем дальше отстоят друг от друга сплошные и штриховые кривые. Эти расхождения требуют комментариев.

В вводной части уже отмечалось, что общим недостатком моделей [26,28,30,31] помимо некорректного расчета энергии системы является то, что первая испущенная ППЧД предполагается неподвижной в процессе испускания второй ППЧД. Это позволяет значительно упростить задачу, так как энергия дислокационной системы оказывается функцией только одной переменной — координаты отрезка  $a'b'$  второй ППЧД. Уширение дефекта упаковки при таком предположении объясняется наличием отрезков полной дислокации  $Aa'$  и  $Bb'$  (рис. 1, c). Эти отрезки имеют больший вектор Бюргера, чем отрезки частичных дислокаций  $aa'$  и  $bb'$ . Естественно, что энергетически выгодно сократить длину отрезков  $Aa'$  и  $Bb'$ , даже за счет удлинения отрезков  $aa'$  и  $bb'$ . В результате создается сила, стремящаяся отдалить отрезки  $ab$  и  $a'b'$  друг от друга, и происходит уширение дефекта упаковки по сравнению со случаем прямолинейных дислокаций в бесконечной среде, когда такой силы нет. Однако, если позволить отрезку  $ab$  первой ППЧД двигаться, результат будет прямо противоположным (по крайней мере, при  $\tau = 0$ ). В этом случае ничто не мешает отрезкам полной дислокации  $Aa'$  и  $Bb'$  просто исчезнуть (в условиях закрепления отрезка  $ab$  этому препятствовало расширение дефекта упаковки). Тогда отрезок  $a'b'$  окажется у самой границы, и отрезок  $ab$  будет к нему притягиваться как за счет сужения дефекта упаковки, так и за счет укорочения отрезков  $aa'$  и  $bb'$ . Таким образом, в трехмерной петлевой модели опять возникает дополнительная сила, отсутствующая в случае прямолинейных дислокаций в бесконечной среде, но на этот раз она вызывает сужение дефекта упаковки.

Из приведенного рассуждения следует, что размерный эффект (влияние размера зерна  $d$  на ширину дефекта упаковки  $s_0$ ) в чистом виде, без учета внешнего напряжения, должен быть отрицательным — с уменьшением  $d$  должна падать и  $s_0$ , а ширина дефекта упаковки при  $\tau = 0$  должна быть меньше, чем в бесконечной среде, т.е.  $s_0/s^* < 1$ . Предыдущие модели [26,28,30,31] давали противоположный результат из-за предположения о неподвижности первой ППЧД. Что касается общего вида зависимости  $s_0(d)$ , то в предыдущих моделях [26,28,30,31] он определялся балансом двух факторов: энергии дефекта упаковки и собственной энергии отрезков полной дислокации  $Aa'$  и  $Bb'$  (рис. 1, c). Поскольку, как следует из приведенного выше рассуждения, этот механизм реализуется только в предположении закрепления первой ППЧД, в нашей модели он не реализуется. Таким образом, причиной коренного отличия сплошных и штриховых кривых  $s_0(d)/s^*$  на рис. 5 и 6 являются разные механизмы, играющие роль в формировании широких дефектов упаковки.

Анализируя формулу (22), можно указать и на другие существенные недостатки подхода, использованного в работах [26,28,30,31]. Видно, что (22) представляет собой функцию, подобную гиперболе и имеющую вертикальную асимптоту и разрыв второго рода при некотором значении  $d = d_a$ , зависящем от  $\tau$ . При  $d < d_a$  формула (22) не имеет физического смысла, поскольку  $s_0(d)/s^*$  становится отрицательным. Подобная зависимость  $s_0(d)$  является прямым следствием искусственно введенного размера зерна: в моделях [26,28,30,31] за размер зерна принимали длину отрезка  $AB$  (рис. 1). В направлении скольжения дислокационных отрезков  $ab$  и  $a'b'$  никаких пространственных ограничений не вводилось. При больших значениях  $\tau$ , когда знаменатель в (22) становится отрицательным при любых  $d$ , эта формула также теряет смысл. Настоящая модель лишена этих недостатков, поскольку использование дислокационных петель позволяет естественным образом ввести как поперечный, так и продольный размер зерна. Как следствие расширение ППЧД оказывается ограниченным, а ширина дефекта упаковки не может стать больше размера зерна  $d$ . Отсюда и возникают пики на зависимостях  $s_0(d)/s^*$  при конечных  $\tau$  (рис. 5, a, b и 6).

В результате можно сделать следующий вывод: аномальная ширина дефектов упаковки в нанокристаллическом Al объясняется исключительно действием внешнего напряжения. Результаты предыдущих моделей [26,28,30,31], которые объясняли аномальную ширину дефекта упаковки еще и размерным эффектом (в отсутствие внешнего напряжения), верны только при строгом выполнении условия неподвижности первой ППЧД. В общем же случае размерный эффект является отрицательным, т.е. с уменьшением размера зерна ширина дефекта упаковки должна падать. Вероятнее всего, широкие дефекты упаковки формируются под действием сильных внутренних напряжений ( $> 1$  GPa), возникающих в процессе изготовления или локального

нагружения нанокристаллического Al. Уширение дефекта упаковки, сопоставимое с наблюдавшимся в эксперименте [26], возможно при очень высоких значениях упругих напряжений, формирующихся либо на стадии изготовления нанокристаллических образцов путем интенсивной пластической деформации (как при криогенном размоле порошка Al в шаровых мельницах [24–26]), либо при сильно неоднородном механическом нагружении наноматериала (как при наноиндентировании тонких нанокристаллических пленок [17]). При этом нанокристаллическое состояние чистого Al обеспечивает отсутствие других эффективных каналов релаксации, кроме испускания частичных или расщепленных дислокаций границами зерен, и тем самым позволяет внутренним упругим напряжениям достичь необходимого уровня.

## Список литературы

- [1] R.Z. Valiev, I.V. Alexandrov, Y.T. Zhu, T.C. Lowe. *J. Mater. Res.* **17**, 1, 5 (2002).
- [2] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang. *Acta Mater.* **51**, 3, 387 (2003).
- [3] X. Zhang, H. Wang, R.O. Scattergood, J. Narayan, C.C. Koch, A.V. Sergueeva, A.K. Mukherjee. *Appl. Phys. Lett.* **81**, 5, 823 (2002).
- [4] S.X. McFadden, R.S. Mishra, R.Z. Valiev, A.P. Zhilyaev, A.K. Mukherjee. *Nature* **398**, 6729, 684 (1999).
- [5] R.S. Mishra, R.Z. Valiev, S.X. McFadden, R.K. Islamgaliev, A.K. Mukherjee. *Phil. Mag. A* **81**, 1, 37 (2001).
- [6] A.K. Mukherjee. *Mater. Sci. Eng. A* **322**, 1/2, 1 (2002).
- [7] K.A. Padmanabhan, H. Gleiter. *Mater. Sci. Eng. A* **381**, 1/2, 28 (2004).
- [8] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев. *ФТТ* **47**, 5, 816 (2005).
- [9] Р.З. Валиев, И.В. Александров. *Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией*. Логос, М. (2000). 272 с.
- [10] Ю.Р. Колобов, Р.З. Валиев, Г.П. Грабовецкая и др. *Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов*. Наука, Новосибирск (2001). 232 с.
- [11] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *Физическая механика деформированных наноструктур*. Т. 1. Нанокристаллические материалы. Янус, СПб (2003). 194 с.
- [12] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic Deformation in Nanocrystalline Materials*. Springer, Berlin–Heidelberg–N.Y. (2004). 198 p.
- [13] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *ФТТ* **46**, 11, 1986 (2004).
- [14] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. *ФТТ* **46**, 11, 1975 (2004).
- [15] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. *ФТТ* **47**, 5, 793 (2005).
- [16] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. *ФТТ* **47**, 9, 1602 (2005).
- [17] M. Chen, E. Ma, K.J. Hemker, H. Sheng, Y.M. Wang, X. Cheng. *Science* **300**, 5623, 1275 (2003).
- [18] H. Van Swygenhoven, M. Spaczer, A. Caro, D. Farkas. *Phys. Rev. B* **60**, 1, 22 (1999).
- [19] T. Shimokawa, A. Nakatani, H. Kitagawa. *Phys. Rev. B* **71**, 224 110 (2005).
- [20] V. Yamakov, D. Wolf, M. Salazar, S.R. Phillpot, H. Gleiter. *Acta Mater.* **49**, 14, 2713 (2001).
- [21] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter. *Nature Mater.* **1**, 1, 45 (2002).
- [22] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, H. Gleiter. *Acta Mater.* **50**, 20, 5005 (2002).
- [23] P.M. Derlet, H. Van Swygenhoven. *Scripta Mater.* **47**, 11, 719 (2002).
- [24] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, S.G. Srinivasan, M.I. Baskes, D.W. He, Y.T. Zhu. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4, 632 (2003).
- [25] X.Z. Liao, F. Zhou, E.J. Lavernia, D.W. He, Y.T. Zhu. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 24, 5062 (2003).
- [26] X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, Y.H. Zhao, M.I. Baskes, Y.T. Zhu, F. Zhou, E.J. Lavernia, H.F. Xu. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 18, 3564 (2004).
- [27] М.А. Штремель. *Прочность сплавов. Часть I. Дефекты решетки*. МИСИС, М. (1999). 384 с.
- [28] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, E.J. Lavernia. *J. Appl. Phys.* **98**, 034 319 (2005).
- [29] R.C. Pond, L.M.F. Garcia-Garcia. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **61**, 495 (1981).
- [30] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, S.G. Srinivasan, Y.H. Zhao, M.I. Baskes, F. Zhou, E.J. Lavernia. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 21, 5049 (2004).
- [31] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **7**, 2, 75 (2004).
- [32] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **52**, 13, 3793 (2004).
- [33] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Phil. Mag.* (2006), in print.
- [34] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman. *Phys. Stat. Sol. (b)* **241**, 8, 1810 (2004).
- [35] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*. Martinus Nijhoff, Dordrecht (1987).
- [36] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, Yu.I. Meshcheryakov. *J. Phys. III France* **3**, 8, 1563 (1993).
- [37] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 600 с.