

07,12

## Испускание дислокаций из межфазных границ в деформируемых нанокompозитах

© С.В. Бобылев<sup>1–3</sup>, И.А. Овидько<sup>1–3</sup>

<sup>1</sup> Научно-исследовательская лаборатория „Механика новых наноматериалов“, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: bobylev.s@gmail.com

(Поступила в Редакцию 24 ноября 2015 г.)

Предложена теоретическая модель испускания решеточных дислокаций из малоугловых межфазных границ, характеризующихся как ориентационным, так и дилатационным несоответствием, в деформируемых нанокompозитах. С учетом влияния свободной поверхности материала рассчитаны силы, действующие на дислокации структуры межфазной границы, используя которые найдены зависимости критического сдвигового напряжения для испускания дислокации от различных параметров границы. Показано, что влияние дилатационного несоответствия и близости межфазной границы к свободной поверхности на испускание дислокаций незначительно. Установлено, что с точки зрения способности к испусканию дислокаций межфазные границы неоднородны — испускание некоторых дислокаций облегчено по сравнению с обычными малоугловыми границами зерен, тогда как испускание других — может быть значительно затруднено.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 14-29-00199).

### 1. Введение

Межфазные границы в наноструктурных композитах (нанокompозитах) играют исключительно важную роль в формировании механических, физических и химических свойств этих материалов и поэтому являются предметом интенсивных научных исследований (см., например, [1–12]). Такие границы, как правило, характеризуются дилатационным несоответствием, которое обусловлено несовпадением параметров кристаллической решетки разных фаз. Межфазные границы с дилатационным несоответствием в особенности типичны для композитов типа пленка/подложка. Вместе с тем, зачастую межфазные границы в кристаллических композитах одновременно характеризуются и ориентационным несоответствием (углом разориентировки) [13]. Ранее нами была предложена теоретическая модель [12], позволяющая описывать дислокационную структуру таких границ.

Хорошо известно, что обычные границы зерен в нанокристаллических материалах при определенных условиях являются эффективными источниками скользящих решеточных дислокаций и, как следствие, существенным образом влияют на процессы пластической деформации наноматериалов [14–18]. Естественно предположить, что и межфазные границы в нанокompозитах могут выступать в аналогичной роли. До настоящего времени, однако, вопрос испускания дислокаций из межфазных границ теоретически не исследовался. Основная цель настоящей работы — построение теоретической модели,

которая эффективно описывает испускание скользящих решеточных дислокаций в нанокompозитах из межфазных границ, характеризующихся одновременно дилатационным и ориентационным несоответствием. Предлагаемая модель базируется на ранее предложенной модели [12], которая, в свою очередь, основана на теории Франка–Билби [13].

### 2. Дислокационная модель малоугловой межфазной границы. Поля упругих напряжений границы и силы, действующие на дислокации

Используя модель [12] дислокационной структуры малоугловой межфазной границы, характеризующейся не только ориентационным несоответствием (т.е. углом разориентировки  $\theta$ ), но и дилатационным несоответствием, поставим задачу найти критическое (минимальное) напряжение, необходимое для испускания дислокаций из такой границы. В работе [12] рассматривалась межфазная граница в системе типа пленка/подложка, параллельная свободной поверхности материала. В настоящей работе мы рассмотрим аналогичную систему. Влияние свободной поверхности в случае необходимости можно устранить путем предельного перехода  $h \rightarrow \infty$ , где  $h$  — расстояние от плоскости границы до свободной поверхности (рис. 1, а). Ниже кратко изложим основные результаты работы [12].

Согласно [12] малоугловая межфазная граница может быть представлена как асимметричная граница наклона, представляющая собой суперпозицию нескольких дислокационных ансамблей, а именно: континуального распределения виртуальных дислокаций вдоль плоскости границы, называемых генераторами напряжений, и реальных решеточных дислокаций — аннигиляторов напряжений (рис. 1, *a*). В рамках модели [12] аннигиляторы напряжений представляют собой два периодических семейства краевых дислокаций, характеризующихся векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$  и периодами следования  $d_1, d_2$  (см. рис. 1, *a*). Выберем направления векторов  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  как показано на рис. 1, *a* и будем считать  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  взаимно перпендикулярными и равными по модулю  $b_1 = b_2 = b$  (такое предположение естественно, если материал имеет ОЦК-решетку). В данном случае в системе координат, представленной на рис. 1, *a*, проекции векторов  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  имеют вид

$$\begin{aligned} b_{1x} &= -b \sin \theta, & b_{1y} &= b \cos \theta, \\ b_{2x} &= -b \cos \theta, & b_{2y} &= -b \sin \theta. \end{aligned} \quad (1)$$

В рамках предположений, сделанных в [12], получены следующие выражения для периодов  $d_1$  и  $d_2$ :

$$d_1 = \frac{b}{\sin \theta}, \quad d_2 = \frac{b}{1 + f - \cos \theta}, \quad (2)$$

где  $f = (a_f - a_s)/a_s$  — параметр, характеризующий дилатационное несоответствие между фазами пленки и подложки,  $a_f$  и  $a_s$  — параметры решетки пленки и подложки.

Также, в работе [12] были найдены компоненты тензора поля напряжений  $\sigma_{ij}$ , создаваемые дислокационной структурой, которая показана на рис. 1, *a*. При этом обе фазы полагались упругими изотропными материалами, характеризующимися одинаковыми значениями модуля сдвига  $G$  и коэффициента Пуассона  $\nu$ . Поле напряжений  $\sigma_{ij}$  удобно представить в виде следующей суммы

$$\sigma_{ij}(x, y, s) = \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(2)}(x - s, y) + \sigma_{ij}^{(g)}, \quad (3)$$

где  $\sigma_{ij}^{(1)}(x, y)$  и  $\sigma_{ij}^{(2)}(x, y)$  — поля напряжений первого и второго семейства дислокаций-аннигиляторов напряжений,  $s$  — параметр, задающий смещение одного семейства относительно другого (см. рис. 1, *a*),  $\sigma_{ij}^{(g)}$  — поле напряжений дислокаций-генераторов. Согласно [12]

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{(k)}(x, y) &= \frac{G}{1 - \nu} \left[ \frac{b_{kx}}{d_k} \sin Y_k \left( -\frac{1}{2A_k^-} + \frac{1}{2A_k^+} \right) \right. \\ &\quad - \frac{X_k^- \sinh X_k^-}{2A_k^{-2}} + \frac{X_k^+ \sinh X_k^+}{2A_k^{+2}} - \frac{X_k H_k \cosh X_k^+}{A_k^{+2}} \\ &\quad + \left. \frac{2X_k H_k \sinh^2 X_k^+}{A_k^{+3}} \right] + \frac{b_{ky}}{d_k} \left( \frac{X_k^- B_k^-}{A_k^{-2}} - \frac{X_k^- B_k^+}{A_k^{+2}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{X_k H_k \sinh X_k^+ \cos Y_k}{A_k^{+2}} + \frac{2X_k H_k B_k^+ \sinh X_k^+}{A_k^{+3}} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{(k)}(x, y) &= \frac{G}{1 - \nu} \left[ \frac{b_{kx}}{d_k} \sin Y_k \left( -\frac{1}{2A_k^-} + \frac{1}{2A_k^+} \right) \right. \\ &\quad + \frac{X_k^- \sinh X_k^-}{2A_k^{-2}} - \frac{(X_k - 3H_k) \sinh X_k^+}{2A_k^{+2}} \\ &\quad + \left. \frac{X_k H_k \cosh X_k^+}{A_k^{+2}} - \frac{2X_k H_k \sinh^2 X_k^+}{A_k^{+3}} \right] + \frac{b_{ky}}{d_k} \\ &\quad \times \left( \frac{\sinh X_k^-}{A_k^-} - \frac{\sinh X_k^+}{A_k^+} - \frac{X_k^- B_k^-}{2A_k^{-2}} + \frac{(X_k + 3H_k) B_k^+}{2A_k^{+2}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{X_k H_k \sinh X_k^+ \cos Y_k}{A_k^{+2}} - \frac{2X_k H_k B_k^+ \sinh X_k^+}{A_k^{+3}} \right), \end{aligned} \quad (5)$$

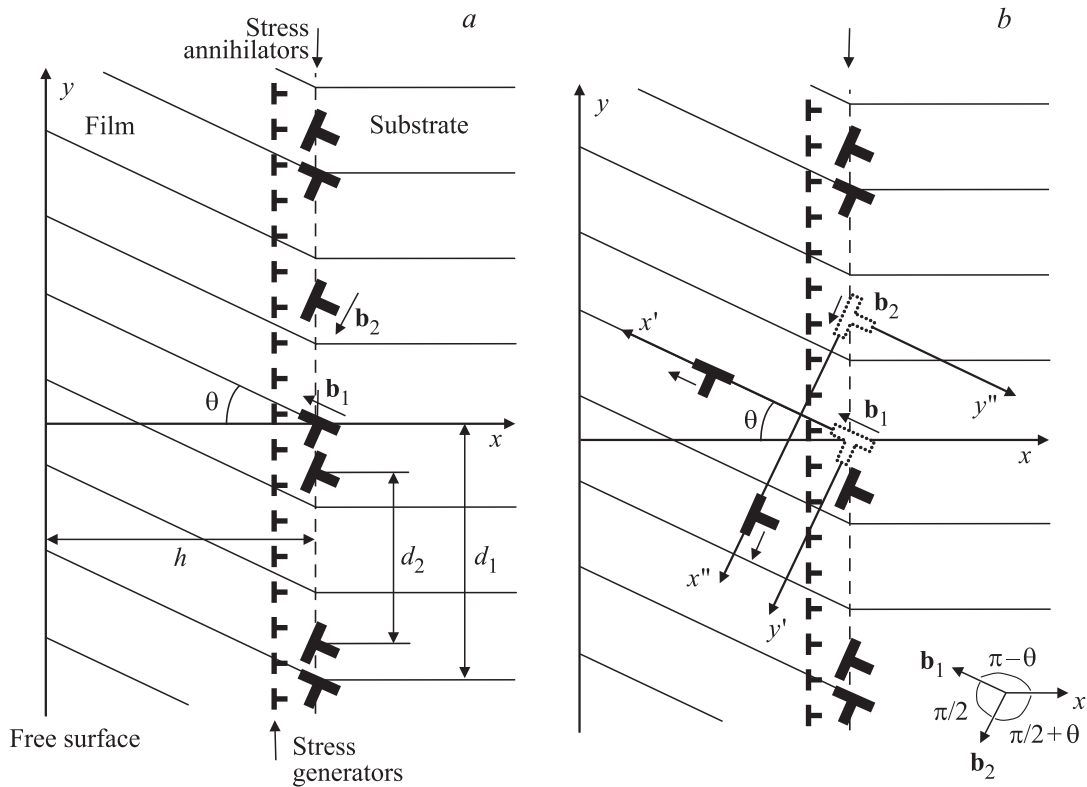
$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(k)}(x, y) &= \frac{G}{1 - \nu} \left[ \frac{b_{kx}}{d_k} \left( \frac{X_k^- B_k^-}{2A_k^{-2}} + \frac{X_k^- B_k^+}{2A_k^{+2}} + \frac{X_k^- \sinh X_k^-}{2A_k^{-2}} \right) \right. \\ &\quad + \frac{X_k H_k \sinh X_k^+ \cos Y_k}{A_k^{+2}} - \frac{2X_k H_k B_k^+ \sinh X_k^+}{A_k^{+3}} \\ &\quad + \frac{b_{ky}}{d_k} \sin Y_k \left( -\frac{1}{2A_k^-} + \frac{1}{2A_k^+} + \frac{X_k^- \sinh X_k^-}{2A_k^{-2}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{X_k^+ \sinh X_k^+}{2A_k^{+2}} - \frac{X_k H_k \cosh X_k^+}{A_k^{+2}} + \frac{2X_k H_k \sinh^2 X_k^+}{A_k^{+3}} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь  $X_k^\pm = \frac{2\pi(x \pm h)}{d_k}$ ,  $X_k = \frac{2\pi x}{d_k}$ ,  $H_k = \frac{2\pi h}{d_k}$ ,  $A_k^\pm = \cosh X_k^\pm - \cos Y_k$ ,  $B_k^\pm = \cosh X_k^\pm \cos Y_k - 1$ ,  $k = 1, 2$ . Выражения (4)–(6) задают поля напряжений бесконечной периодической стенки краевых дислокаций с произвольным вектором Бюргерса, находящейся на расстоянии  $h$  от свободной поверхности и параллельной ей. При этом дислокационный ансамбль расположен так, чтобы ось  $x$  (см. систему координат на рис. 1, *a*) проходила через одну из дислокаций. В свою очередь, тензор  $\sigma_{ij}^{(g)}$  напряжений дислокаций-генераторов равен

$$\sigma_{xx}^{(g)} = \sigma_{yy}^{(g)} = 0, \quad \sigma_{xy}^{(g)} = \begin{cases} \frac{2G[1 - (1 + f) \cos \theta]}{1 - \nu}, & x < h. \\ 0, & x > h. \end{cases} \quad (7)$$

Подставляя (4)–(7) в формулу (3) мы получаем искомого поля напряжений  $\sigma_{ij}$ .

Для того чтобы определить критическое напряжение испускания дислокации из границы, необходимо найти силы, действующие на дислокации-аннигиляторы напряжений при движении в их плоскостях скольжения со стороны всех остальных дислокаций. Поскольку имеются два семейства таких дислокаций, введем в рассмотрение две силы  $F_1$  и  $F_2$  и будем рассматривать испускание дислокаций в пленку (в направлении свободной поверхности). Для определения выражений, описывающих силы, удобно ввести системы координат  $Ox'y'$  и  $Ox''y''$ , связанные непосредственно с теми дислокациями, на которые действуют рассматриваемые силы (точнее говоря, с их исходными положениями, которые показаны



**Рис. 1.** Дислокационная модель малоугловой асимметричной границы наклона между подложкой и пленкой, характеризующейся как ориентационным, так и дилатационным несоответствием. (а) Исходное состояние. (б) Две дислокации, принадлежащие разным дислокационным семействам испускаются (их исходное положение показано белыми знаками дислокаций). Показаны системы координат, связанные с испускаемыми дислокациями (см. текст).

как открытые значки дислокаций на рис. 1, б). При этом достаточно проанализировать испускание какой-то одной выбранной дислокации семейства, несмотря на то, что каждая из этих дислокаций находится в разных условиях из-за наложения другого семейства, что приводит к различной картине распределения напряжений в окрестностях дислокаций (вследствие разницы расстояний до дислокаций другого семейства). Однако варьируя параметр  $s$ , задающий смещение одного семейства относительно другого (рис. 1, а), мы можем воссоздать для любой выбранной дислокации все возможные варианты конфигураций дефектов.

В качестве пробных будем использовать дислокации с координатами  $(x = h, y = 0)$  и  $(x = h, y = s)$  на рис. 1. Соответственно, начала систем координат  $Ox'y'$  и  $Ox''y''$  лежат в этих точках, а оси  $x'$  и  $x''$  в плоскостях скольжения дислокаций, с которыми они связаны, и направлены по направлению к свободной поверхности. Тогда силы  $F_1$  и  $F_2$  можно записать в виде

$$F_1 = b [\sigma_{x'y'}(x', y' = 0) - \sigma_{x'y'}^{(d)}(x', y' = 0)],$$

$$F_2 = b [\sigma_{x''y''}(x'', y'' = 0) - \sigma_{x''y''}^{(d)}(x'', y'' = 0)]. \quad (8)$$

Здесь  $\sigma_{ij}^{(d)}$  — компоненты тензора напряжений той дислокации (в ее исходном положении), для которой

вычисляется сила  $F_1$  или  $F_2$ . Системы координат  $Ox'y'$  и  $Ox''y''$  получаются путем параллельного переноса и поворота на углы, соответственно,  $\pi - \theta$  и  $3\pi/2 - \theta$  (см. рис. 1, б) из исходной системы координат  $Oxy$ . Компоненты  $\sigma_{x'y'}$ ,  $\sigma_{x''y''}$ ,  $\sigma_{x'y'}^{(d)}$ ,  $\sigma_{x''y''}^{(d)}$  в новых системах координат записываются с помощью стандартной формулы

$$\sigma_{x'y'} = \sigma_{xy} \cos 2\theta - \frac{\sin 2\theta}{2} (\sigma_{yy} - \sigma_{xx}),$$

$$\sigma_{x''y''} = -\sigma_{xy} \sin 2\theta - \frac{\cos 2\theta}{2} (\sigma_{yy} - \sigma_{xx}),$$

$$\sigma_{x'y'}^{(d)} = \sigma_{xy}^{(d)} \cos 2\theta - \frac{\sin 2\theta}{2} (\sigma_{yy}^{(d)} - \sigma_{xx}^{(d)}),$$

$$\sigma_{x''y''}^{(d)} = -\sigma_{xy}^{(d)} \sin 2\theta - \frac{\cos 2\theta}{2} (\sigma_{yy}^{(d)} - \sigma_{xx}^{(d)}). \quad (9)$$

При этом исходные координаты  $(x, y)$  связаны с новыми  $(x', y')$  и  $(x'', y'')$  следующими соотношениями:

$$x = h - x' \cos \theta - y' \sin \theta, \quad y = x' \sin \theta + y' \cos \theta,$$

$$x = h - x'' \sin \theta + y'' \cos \theta, \quad y = s - x'' \cos \theta + y'' \sin \theta. \quad (10)$$

Поля напряжений  $\sigma_{ij}^{(d)}$  одиночной дислокации вблизи свободной поверхности задаются известными (см., например, [19]) формулами

$$\sigma_{xy}^{(d)}(x, y) = \frac{G}{2\pi(1-\nu)} \left[ b_x \left( -\frac{y}{r_-^2} - \frac{2yx_-^2}{r_-^4} + \frac{y}{r_+^2} + \frac{2y(h^2+x^2)}{r_+^4} + \frac{16yxhx_+^2}{r_+^6} \right) + b_y \left( -\frac{x_-}{r_-^2} + \frac{2x_-^3}{r_-^4} + \frac{x_-}{r_+^2} + \frac{2x_+(h^2-6hx-x^2)}{r_+^4} + \frac{16xhx_+^3}{r_+^6} \right) \right], \quad (11)$$

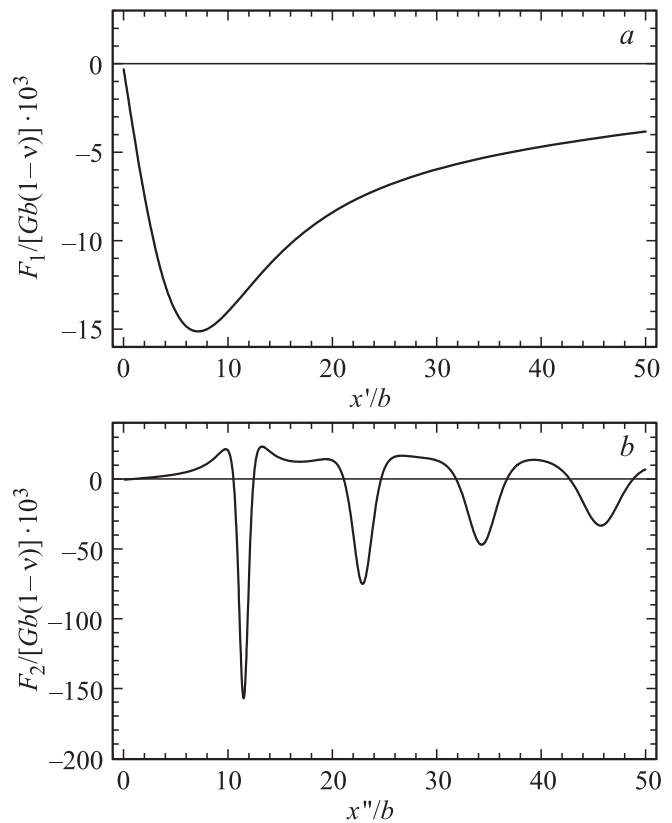
$$\sigma_{yy}(x, y) = \frac{G}{2\pi(1-\nu)} \left[ b_x \left( -\frac{y}{r_-^2} + \frac{2yx_-^2}{r_-^4} + \frac{y}{r_+^2} + \frac{2y(3h^2+4hx-x^2)}{r_+^4} - \frac{16yxhx_+^2}{r_+^6} \right) + b_y \left( \frac{3x_-}{r_-^2} - \frac{2x_-^3}{r_-^4} - \frac{3x_+}{r_+^2} + \frac{2x_+(3h^2+10hx+x^2)}{r_+^4} - \frac{16xhx_+^3}{r_+^6} \right) \right], \quad (12)$$

$$\sigma_{xy}(x, y) = \frac{G}{2\pi(1-\nu)} \left[ b_x \left( -\frac{x_-}{r_-^2} + \frac{2x_-^3}{r_-^4} + \frac{x_+}{r_+^2} + \frac{2x_+(h^2+6hx-x^2)}{r_+^4} - \frac{16xhx_+^3}{r_+^6} \right) + b_y \left( -\frac{y}{r_-^2} + \frac{2yx_-^2}{r_-^4} + \frac{y}{r_+^2} - \frac{2y(h^2+4hx+x^2)}{r_+^4} + \frac{16yxhx_+^2}{r_+^6} \right) \right]. \quad (13)$$

Здесь  $x_{\pm} = x \pm h$ ,  $r_{\pm} = \sqrt{x_{\pm}^2 + y^2}$ .

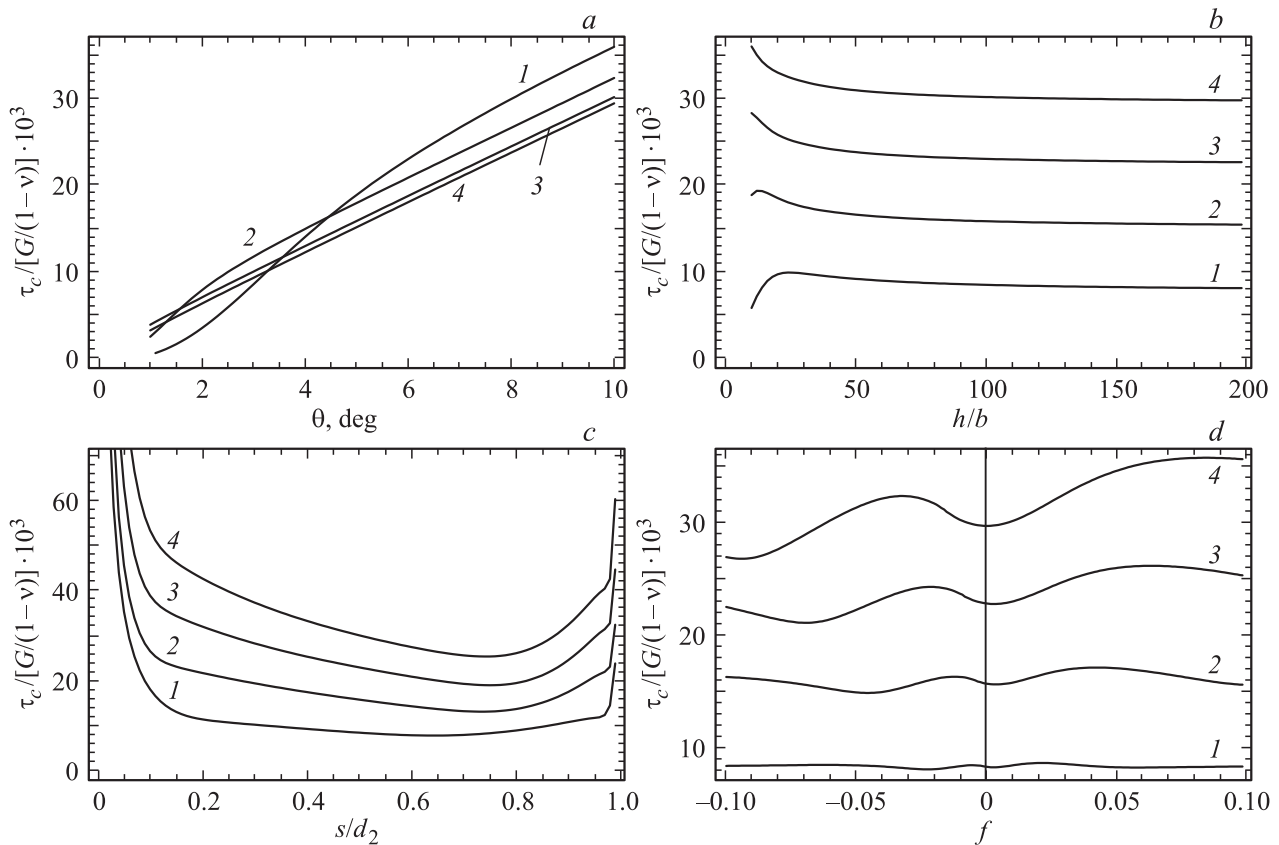
Таким образом, формулы (8) с учетом (9)–(13) и (1)–(7) позволяют определить силы  $F_1$  и  $F_2$ , действующие на дислокации, которые расположены на межфазной границе. Окончательные выражения для сил исключительно громоздки и здесь не приводятся. На рис. 2, *a* и *b* построены характерные зависимости  $F_1$  и  $F_2$  от координат дислокаций  $x'$  и  $x''$  (т.е. от расстояния испускания) для следующих значений параметров задачи:  $\theta = 5^\circ$ ,  $f = 0.01$ ,  $h = 100b$  и  $s = 0$ . Из этих рисунков хорошо видно принципиальное отличие в поведении дислокаций, принадлежащих разным семействам. Зависимость  $F_1(x')$  (рис. 2, *a*) имеет достаточно типичный для малоугловых границ вид (см., например, [20]): при смещении из исходной позиции на дислокацию действует притягивающая к границе сила, которая сначала возрастает (по модулю), достигая максимума, а затем постепенно убывает по мере удаления дислокации. Для испускания дислокации (ее отрыва от границы), очевидно, необходимо приложить отталкивающую от границы силу противоположного знака, превосходящую максимальную притягивающую силу, соответствующую минимуму зависимости  $F_1(x')$ .

С другой стороны, зависимость  $F_2(x'')$  демонстрирует совершенно иной вид (рис. 2, *b*). Кривая  $F_2(x'')$  имеет



**Рис. 2.** Зависимости сил (а)  $F_1$  и (б)  $F_2$ , действующих на испускаемые дислокации соответственно первого и второго семейств, изначально находящиеся в точках  $(x = h, y = 0)$  и  $(x = h, y = s)$ , от координат дислокаций  $x'$  и  $x''$  (расстояния испускания) для следующих значений параметров задачи:  $\theta = 5^\circ$ ,  $f = 0.01$ ,  $h = 100b$  и  $s = 0$ .

ярко выраженный периодический характер с серией минимумов. При этом сравнение с рис. 2, *a* показывает, что максимальная притягивающая сила для дислокаций второго семейства, соответствующая первому минимуму на кривой  $F_2(x'')$  на порядок величины больше таковой для дислокаций первого семейства. Причины такой разницы в поведении дислокаций достаточно очевидны. Плоскости скольжения дислокаций второго семейства образуют небольшой угол (равный  $\theta$ ) с плоскостью границы, т.е. дислокации двигаются практически параллельно плоскости границы, оставаясь достаточно близкими к остальным дислокациям (т.е. очень сильно взаимодействуя с ними) и пересекая максимумы полей напряжений границы, связанные с каждой отдельной дислокацией. С этим и связан периодический характер кривой на рис. 2, *b* и очень большое значение притягивающей силы. Дислокации же первого семейства двигаются практически перпендикулярно плоскости границы, быстро удаляясь от дислокаций межфазной границы, что и обуславливает сравнительно низкий уровень критической величины силы, необходимой для испускания этих дислокаций. Соответственно на практике следует ожидать, что испускаться будут только дислокации первого



**Рис. 3.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  испускания дислокации из малоугловой межфазной границы от (a) угла разориентировки границы  $\theta$  при  $f = 0.01$ ,  $s = 0.5d_2$  и  $h = 10b, 25b, 100b, 1000b$  (кривые 1–4); (b) расстояния  $h$  до свободной поверхности при  $f = 0.01$ ,  $s = 0.5d_2$  и  $\theta = 2.5^\circ, 5^\circ, 7.5^\circ, 10^\circ$  (кривые 1–4); (c) от параметра  $s$ , характеризующего положение дислокаций первого семейства относительно второго, при  $f = 0.01$ ,  $h = 100b$ ,  $\theta = 2.5^\circ, 5^\circ, 7.5^\circ, 10^\circ$  (кривые 1–4); (d) от параметра дилатационного несоответствия  $f$  при  $h = 100b$ ,  $s = 0.5d_2$  и  $\theta = 2.5^\circ, 5^\circ, 7.5^\circ, 10^\circ$  (кривые 1–4).

семейства. Ниже мы исследуем испускание только этих дислокаций.

### 3. Критическое напряжение испускания дислокаций из межфазной границы. Результаты

Обозначим критическое значение силы, при которой испускается дислокация из межфазной границы, как  $F_c$ . Как отмечалось выше, ее значение по модулю равно минимуму зависимости  $F_1(x')$ , найденной в предыдущем разделе. Введем в рассмотрение критическое сдвиговое напряжение  $\tau_c = F_c/b$ . На рис. 3 построены серии кривых, иллюстрирующих зависимости  $\tau_c$  от разных параметров задачи. Так, рис. 3, a иллюстрирует зависимость критического напряжения  $\tau_c$  от угла разориентировки границы  $\theta$  для следующих значений параметров:  $f = 0.01$ ,  $s = 0.5d_2$  и  $h = 10b, 25b, 100b, 1000b$  (кривые 1–4). Хорошо видно, что для случаев, когда граница находится достаточно далеко от свободной поверхности (кривые 3 и 4 на рис. 3, a), зависимости  $\tau_c(\theta)$  являются линейными, что совпадает с поведением обычных ма-

лоугловых симметричных границ наклона [15,20]. Для границ расположенных близко к свободной поверхности (кривые 1 и 2) наблюдается отклонение зависимостей от линейных в области малых углов разориентировки. Более наглядно это демонстрируется на рис. 3, b, где приведены зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от расстояния  $h$  до свободной поверхности для  $f = 0.01$ ,  $s = 0.5d_2$  и  $\theta = 2.5^\circ, 5^\circ, 7.5^\circ, 10^\circ$  (кривые 1–4). Хорошо видно, что фактически уже для  $h > 50b$  влияние свободной поверхности минимально и критическое напряжение  $\tau_c$  остается практически постоянным. В целом же, с уменьшением  $h$  критическое напряжение  $\tau_c$  имеет тенденцию к возрастанию, которая для границ с малым углом разориентировки может сменяться убыванием при экстремально малых значениях  $h \sim 10b$  (кривые 1 и 2 на рис. 3, b).

Рис. 3, c иллюстрирует зависимость критического напряжения  $\tau_c$  от параметра  $s$ , характеризующего положение дислокаций первого семейства относительно второго, и значений  $f = 0.01$ ,  $h = 100b$ ,  $\theta = 2.5^\circ, 5^\circ, 7.5^\circ, 10^\circ$  (кривые 1–4). Достаточно очевидно, что сила  $F_1$  является периодической функцией  $s$  (с периодом  $d_2$ ), поэтому достаточно проанализировать зависимость  $\tau_c(s)$

в диапазоне от 0 до  $d_2$ . Кривые на рис. 3, *c* показывают, что  $\tau_c$  очень сильно зависит от  $s$ . Когда  $s$  приближается к 0 или  $d_2$ , т.е. в ситуациях, где в ближайшей окрестности испускаемой дислокации оказывается дислокация другого семейства,  $\tau_c$  резко возрастает, что обусловлено сильным упругим взаимодействием близко расположенных дислокаций. По сравнению с минимальными значениями  $\tau_c$ , реализующимися при промежуточных значениях  $s$ , рост может составлять до одного порядка величины. Следует, однако, отметить, что это справедливо именно при стремлении  $s$  к 0 или  $d_2$ , т.е. когда дислокации разных семейств сближаются, но остаются на небольшом расстоянии друг от друга. Если же  $s$  строго равно нулю, т.е. когда дислокации сливаются, величина напряжения  $\tau_c$  резко уменьшается до уровня близкого к минимальному. Например, для  $f = 0.01$ ,  $h = 100b$  и  $\theta = 5^\circ$  величина  $\tau_c \approx 0.015$  для  $s = 0$ , а минимальное значение  $\tau_c \approx 0.013$  при  $s = 0.73d_2$  (значения  $\tau_c$  приведены в единицах  $G/(1 - \nu)$ ). Основной вывод, который следует из зависимостей рис. 3, *c* — способность к испусканию дислокаций межфазными границами варьируется вдоль плоскости границы. Испускание некоторых дислокаций может быть значительно затруднено в зависимости от их ближайшего окружения. В общем случае подавлено испускание тех дислокаций, в ближайшей окрестности которых оказываются дислокации второго семейства.

Рис. 3, *d* иллюстрирует зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от параметра дилатационного несоответствия  $f$ , рассчитанные для  $h = 100b$ ,  $s = 0.5d_2$  и  $\theta = 2.5^\circ, 5^\circ, 7.5^\circ, 10^\circ$  (кривые 1–4). Как видно, зависимости  $\tau_c(f)$  имеют достаточно сложный характер с рядом локальных минимумов и максимумов, т.е. при определенных значениях параметра несоответствия эмиссия может как облегчаться, так и затрудняться. В целом, однако, влияние дилатационного несоответствия не слишком значительно. Для реальных значений дилатационного несоответствия, которые редко превосходят (по модулю) величину  $\sim 10^{-2}$ , его влиянием на эмиссию дислокаций можно пренебрегать в сравнении с влиянием прочих параметров.

Сопоставим типичные значения критического напряжения  $\tau_c$ , полученные выше, с таковыми для стандартных малоугловых симметричных границ наклона (см., например, [20]). Для последних в работе [20] приводится следующая оценка критического напряжения:  $\tau_c \approx 1.1D\theta$ , где  $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$ . Аппроксимируя линейные зависимости на рис. 3, *a* для больших значений  $h$  (чтобы устранить влияние свободной поверхности), мы приходим к очень близкому результату  $\tau_c \approx 1.08D\theta$ , т.е. с точки зрения способности к испусканию дислокаций межфазная граница весьма схожа с обычными границами зерен. Этот результат справедлив для конкретного значения  $s$  (в данном случае  $s = 0$ ). Для других значений  $s$  критическое напряжение может быть как и выше, так и ниже (рис. 3, *c*). Таким образом, на межфазной границе имеются „слабые“ и „сильные“ точки, из которых испускание соответственно либо облегчено, либо подавлено,

что является принципиальным отличием от обычных границ зерен. Присутствие свободной поверхности не слишком значительно (не более 10%) влияет на критическое напряжение и, как правило, ведет к его увеличению за исключением границ с очень малыми углами разориентировки и экстремально близких к свободной поверхности (рис. 3, *b*).

Оценим численно уровень критического напряжения на примере некоторых реальных материалов. Так, в системе Cu/Nb (пленки Cu, нанесенные на подложку Nb), характеризующейся значением параметров  $G = 48$  GPa,  $\nu = 0.34$ ,  $b = 0.255$  nm,  $f = 0.09$  [12] (предполагается, что дислокации испускаются в Cu), для межфазной границы с разориентировкой  $\theta = 5^\circ$  в случае сравнительно толстой пленки с  $h = 1000b \approx 250$  nm минимальное значение критического напряжения составляет  $\tau_c \approx 740$  МПа, а для тонкой пленки с  $h = 50b \approx 12$  nm,  $\tau_c \approx 833$  МПа. При этом для обычной малоугловой симметричной границы наклона в Cu с такой же разориентировкой в  $5^\circ$ , согласно оценке [20]  $\tau_c \approx 1.1D\theta$ , критическое напряжение составляет  $\tau_c \approx 925$  МПа. В данном случае испускание из межфазной границы несколько облегчено по сравнению со стандартной границей зерна в однофазном материале. Следует, однако, помнить, что приведенные выше оценки для межфазной границы являются минимальными, справедливыми только для отдельных дислокаций границы. Для прочих дислокаций напряжения испускания могут быть значительно (до порядка величины) выше.

Оценим также численно какие типичные значения может принимать критическое напряжение испускания дислокаций на примере композитных систем на базе титана (Ti). Титан используется в большом числе разнообразных композитных материалов, в том числе и в виде систем пленка/подложка. В качестве подложки может выступать ряд материалов включая керамические ( $ZrO_2$ , TiN,  $Al_2O_3$  и др.). Для определенности рассмотрим ОЦК-фазу Ti ( $\beta$ -Ti), для которой характерны следующие значения параметров:  $G = 40$  GPa,  $\nu = 0.33$ ,  $b = 0.33$  nm. Для границы с разориентировкой  $5^\circ$  в диапазоне параметров несоответствия  $f$  от 0 до 0.1 для толщины  $h = 1000b = 330$  nm минимальное критическое напряжение  $\tau_c$  варьируется в диапазоне от  $\sim 850$  до  $\sim 940$  МПа, для толщины  $h = 50b = 16.5$  nm варьируется в диапазоне от  $\sim 940$  до  $\sim 1000$  МПа. При этом для стандартной малоугловой границы в Ti  $\tau_c \approx 910$  МПа. Как видно, в данном случае в зависимости от конкретной системы испускание дислокаций может как облегчаться, так и затрудняться, но разница напряжений по сравнению со стандартной границей зерна незначительна.

## 4. Заключение

Таким образом, в настоящей работе предложена теоретическая модель испускания скользящих решеточных дислокаций в нанокompозитах из малоугловых межфазных границ, характеризующихся одновременно дилатационным и ориентационным несоответствием, на базе

развитой раньше дислокационной модели [12] подобной границы. В рамках подхода [12] малоугловая межфазная граница в системе типа пленка/подложка, представляется в виде системы двух периодических семейств краевых дислокаций и континуального распределения виртуальных дислокаций-генераторов напряжений, моделирующего дилатационные напряжения несоответствия (рис. 1).

Рассчитаны силы, действующие на дислокации границы, и показано, что на практике возможно испускание только дислокаций одного из семейств, плоскости скольжения которых составляет большой угол с плоскостью границы (приблизительно перпендикулярны). Критическое напряжение, необходимое для испускания дислокаций второго семейства, плоскости скольжения которых образуют малый угол с плоскостью границы, на порядок величины выше. Для дислокаций первого семейства определены величины критического сдвигового напряжения, необходимого для испускания (отрыва от границы) и найдены его зависимости от различных параметров системы. Показано, что в целом испускание дислокаций из межфазных границ реализуется приблизительно при таких же уровнях напряжений, что и в обычных границах зерен. Также показано, что влияние близости к свободной поверхности и величины параметра несоответствия на испускание дислокаций незначительно. Принципиальным отличием межфазных границ в плане испускания дислокаций по сравнению с обычными границами зерен является неодинаковость условий испускания для разных дислокаций в зависимости от их ближайшего окружения. Как следствие, испускание части дислокаций облегчено, в то время как для некоторых дислокаций может быть, напротив, сильно затруднено. Подавляется испускание дислокаций, в ближайшей окрестности которых оказывается дислокация второго семейства.

## Список литературы

- [1] J.H. Van der Merve. *Crit. Rev. Solid. State Mater. Sci.* **17**, 187 (1991).
- [2] L.B. Freund, S. Suresh. *Thin film materials: stress, defect formation, and surface evolution*. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [3] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *Adv. Phys.* **55**, 627 (2006).
- [4] С.В. Бобылев, И.А. Овидько, А.Е. Романов, А.Г. Шейнерман. *ФТТ* **48**, 248 (2006).
- [5] M. Aminpour, O. Trushin, T.S. Rahman. *Phys. Rev. B* **84**, 035455 (2011).
- [6] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Н.А. Феоктистов. *ФТТ* **56**, 1457 (2014).
- [7] Ю.А. Бойков, Т. Класон. *ФТТ* **56**, 2361 (2014).
- [8] J. Kwon, M.L. Bowers, M.C. Brandes, V. McCreary, I.M. Robertson, P. Sudharshan Phani, H. Bei, Y.F. Gao, G.M. Pharr, E.P. George, M.J. Mills. *Acta Mater.* **89**, 315 (2015).
- [9] М.В. Кузьмин, М.А. Митцев, А.М. Мухучев. *ФТТ* **57**, 2056 (2015).
- [10] Ю.Г. Сидоров, М.В. Якушев, В.С. Варавин, А.В. Колесников, Е.М. Труханов, И.В. Сабина, И.Д. Лошкарев. *ФТТ* **57**, 2095 (2015).
- [11] А.В. Редьков, А.В. Осипов, С.А. Кукушкин. *ФТТ* **57**, 2451 (2015).
- [12] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko, B.N. Semenov, A.G. Sheinerman. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **32**, 24 (2012).
- [13] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. *Interfaces in crystalline materials*. Oxford Science Publ., Oxford (1996). 819 p.
- [14] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. *Mater. Sci. Eng. A* **339**, 73 (2003).
- [15] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **52**, 3793 (2004).
- [16] Y.M. Wang, E. Ma. *Acta Mater.* **52**, 1699 (2004).
- [17] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko, A.K. Mukherjee. *Scr. Mater.* **60**, 36 (2009).
- [18] Y. Estrin, A. Vinogradov. *Acta Mater.* **61**, 782 (2013).
- [19] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 7925 (2003).
- [20] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman, R.Z. Valiev. *Scr. Mater.* **76**, 45 (2014).