07,12

# Зарождение трещин вблизи свободной поверхности в деформируемых металлических наноматериалах с бимодальной структурой

© И.А. Овидько[1–3], А.Г. Шейнерман[1–3]

[1] Научно-исследовательская лаборатория „Механика новых наноматериалов“,
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[3] Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: ovidko@nano.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 24 ноября 2015 г.)

Построена теоретическая модель, которая эффективно описывает зарождение трещин в полях напряжений дислокационных скоплений вблизи свободной поверхности в металлических наноматериалах с бимодальной структурой. Рассчитаны зависимости критического напряжения $\tau_c$ (для образования трещины с равновесной длиной 10 nm на дислокационном скоплении вблизи поверхности) от размера $d$ зерна, содержащего дислокационное скопление, для меди с бимодальной структурой. Теоретически выявлено, что значение критического напряжения $\tau_c$ для зарождения трещины вблизи свободной поверхности в металлическом наноматериале с бимодальной структурой примерно на 30% выше такового для зарождения трещины внутри наноматериала в удалении от свободной поверхности.

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

## 1. Введение

Нанокристаллические и ультрамелкозернистые материалы (далее наноматериалы) с их уникальными механическими, физическими и химическими свойствами являются предметом интенсивных научных исследований (например, [1–11]). Так, металлические наноматериалы характеризуются превосходными механическими свойствами, включая высокие пределы текучести и прочности, высокую износостойкость, способность некоторых наноматериалов к сверхпластической деформации; см. обзоры [1–5] и монографию [6]. При этом поведение металлических наноматериалов под механической нагрузкой во многом задается действием особых физических механизмов пластической деформации в таких наноматериалах. В частности, в металлических наноматериалах пластическая деформация эффективно реализуется посредством таких специфических (для металлических наноструктур) механизмов деформации как: решеточное скольжение и деформационное наноодвойникование, носителями которых являются полные и частичные дислокации, зарождающиеся на границах зерен; зернограничное скольжение; стимулируемая напряжением миграция границ зерен; наномасштабная ротационная деформация; деформация, переносимая зернограничной диффузией и диффузией вдоль тройных стыков границ зерен [1–6,12–19].

Особые физические механизмы пластической деформации и обычное решеточное скольжение (которое доминирует в крупнозернистых поликристаллических металлах) одновременно действуют в металлических наноматериалах с бимодальной структурой, каждый из которых состоит из нанокристаллической или ультрамелкозернистой матрицы и больших зерен, размеры которых значительно больше среднего размера зерен матрицы [20–22] (рис. 1). Задаваемое особенностями бимодальной структуры кооперативное действие нескольких механизмов деформации определяет превосходные механические свойства (прежде всего, уникальное сочетание высокой прочности и функциональной пластичности) металлических наноматериалов с бимодальной структурой [20–22].

Наряду с наноструктурой, эффекты свободной поверхности существенно влияют на механизмы деформации и механические свойства металлических наноматериалов [23–26]. Например, данные эффекты акцентированно проявляются в металлических микроколоннах, которые характеризуются сверхпрочностью [23,25], вследствие быстрого ухода и исчезновения дислокаций (носителей пластической деформации) на свободных поверхностях деформируемых микроколонн [23,25]. Вместе с тем, влияние свободных поверхностей на процессы пластической деформации и разрушения остается мало изученным явлением в наноматериалах, в частности, в металлических наноматериалах с бимодальной структурой. Основная цель настоящей работы — построение теоретического описания влияния свободной поверхности на зарождение трещин в поле напряжений дислокационного скопления — носителя пластической деформации в большом зерне металлического наноматериала с бимодальной структурой.

## 2. Модель

Рассмотрим деформируемый металлический наноматериал с бимодальной структурой, состоящий из нанокристаллической или ультрамелкозернистой матрицы и микроскопических зерен, размеры которых значительно больше среднего размера зерен матрицы (рис. 1). Для удобства в дальнейшем будем называть микроскопические зерна большими независимо от их размера. Пусть сдвиговая нагрузка, приложенная к одной из поверхностей материала, создает в нем постоянное сдвиговое напряжение $\tau$. Рассмотрим случай, когда в результате действия дислокационного источника Франка–Рида в одном из больших зерен, примыкающих к поверхности, образуется скопление краевых решеточных дислокаций с векторами Бюргерса **b** (рис. 2). Наличие в наноматериале бимодальной структуры приводит к сочетанию высокого напряжения течения $\tau$ и большой длины скопления, недостижимому в наноматериалах с примерно одинаковыми размерами зерен. Как следствие, если размер $d$ большого зерна и величина приложенного напряжения $\tau$ достаточно велики, высокие напряжения, действующие вблизи головной дислокации скопления, могут привести к зарождению нанотрещины (рис. 2).

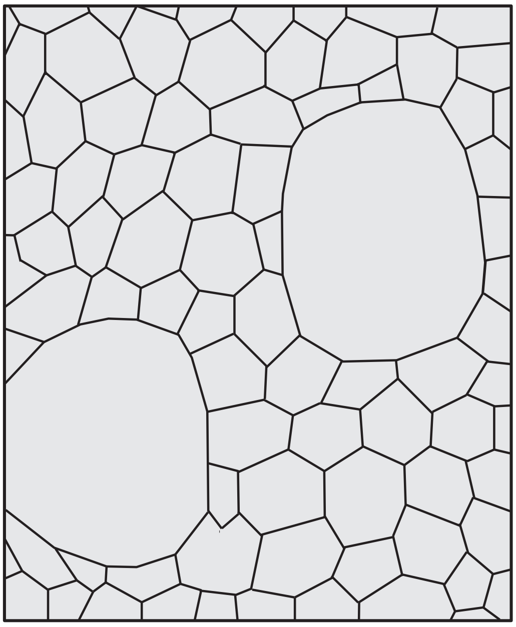

**Рис. 1.** Наноматериал с бимодальной структурой (схематически).

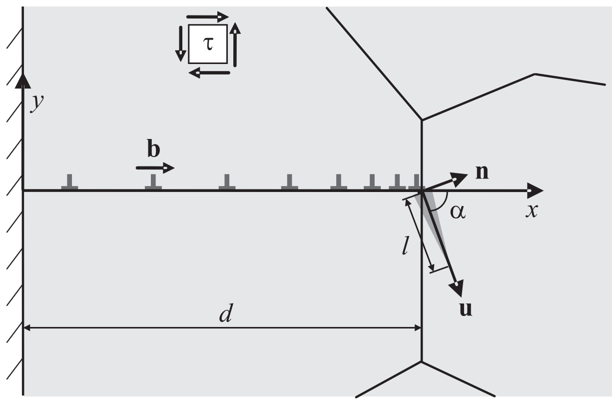


**Рис. 2.** Зарождение нанотрещины на дислокационном скоплении, заторможенном на границе зерна вблизи свободной поверхности деформируемого металла с бимодальной структурой.

## 3. Расчет условий зарождения и роста нанотрещины

Рассчитаем условия зарождения и роста нанотрещины в поле напряжений такого дислокационного скопления. Для этого введем систему координат $(x, y)$, как показано на рис. 2. Обозначим координату головной дислокации скопления $x = d$, длину трещины как $l$, а угол между плоскостью нанотрещины и направлением оси $x$ как $\alpha$. Для расчета условий роста внутризеренной нанотрещины воспользуемся энергетическим критерием [27]

$$F > 2\gamma, \tag{1}$$

где $F$ — конфигурационная сила (упругая энергия, высвобождаемая при росте трещины на единицу длины), а $\gamma$ — удельная поверхностная энергия. Для расчета конфигурационной силы $F$ воспользуемся стандартным приближением, в рамках которого металлический материал считается упругоизотропным и имеет модуль сдвига $G$ и коэффициент Пуассона $\nu$. Введем систему координат $(u, n)$, связанную с плоскостью трещины, как показано на рис. 2. В рассматриваемом случае упругоизотропного материала и плоского деформируемого состояния конфигурационная сила $F$ рассчитывается по формуле [27]

$$F = \frac{\pi l(1-\nu)}{4G}\left(\overline{\sigma}_{nn}^2 + \overline{\sigma}_{un}^2\right), \tag{2}$$

где $\sigma_{nn}$ и $\sigma_{un}$ — компоненты поля напряжений, создаваемых приложенной нагрузкой $\tau$ и дислокационным скоплением, а $\overline{\sigma}_{nn}$ и $\overline{\sigma}_{un}$ — средневзвешенные значения этих напряжений, определяемые соотношением [27]

$$\overline{\sigma}_{kn} = \frac{2}{\pi l}\int_0^l \sigma_{kn}(u, n=0)\sqrt{\frac{u}{l-u}}du, \qquad k = n, u. \tag{3}$$

В формуле (3) координата $u$ при $n = 0$ связана с координатами $x$ и $y$ выражениями $x = d + u\cos\alpha$, $y = -u\sin\alpha$.

Напряжения $\sigma_{un}$ и $\sigma_{nn}$ рассчитываются по формулам

$$\sigma_{un} = \left(\sigma^p_{xx} - \sigma^p_{yy}\right)\sin\alpha\cos\alpha + \left(\sigma^p_{xy} + \tau\right)\cos(2\alpha), \quad (4)$$

$$\sigma_{un} = \sigma^p_{xx}\cos^2\alpha + \sigma^p_{yy}\sin^2\alpha + \left(\sigma^p_{xy} + \tau\right)\sin(2\alpha), \quad (5)$$

где $\sigma^p_{ij}$ $(i, j = x, y)$ — поле напряжений, создаваемых дислокационным скоплением. В свою очередь, напряжения $\sigma^p_{ij}(x, y)$, создаваемые дислокационным скоплением, связаны с напряжениями $\sigma^d_{ij}$, создаваемые входящими в него дислокациями, соотношением

$$\sigma^p_{ij}(x, y) = \sum_{k=0}^{N} \sigma^d_{ij}(x, x_k, y), \quad (6)$$

где $N+1$ — число дислокаций в скоплении, а $x_0$, $x_1$, …, $x_N$ — координаты входящих в него дислокаций. В упругоизотропном приближении напряжения $\sigma^d_{ij}$ рассчитываются по формулам [28]

$$\sigma^d_{xx}(x, h, y) = \frac{Db}{2}\left\{-\frac{2y}{r_1^2} - \frac{4x_1^2y}{r_1^4} + \frac{2y}{r_2^2} + \frac{4x_2^2y}{r_2^4} - 2h\left[\frac{4x_2y}{r_2^4} - \frac{16x_2^3y}{r_2^6} - 2h\left(\frac{2y}{r_2^4} - \frac{8x_2^2y}{r_2^6}\right)\right]\right\}, \quad (7)$$

$$\sigma^d_{yy}(x, h, y) = \frac{Db}{2}\left\{-\frac{2y}{r_1^2} + \frac{4x_1^2y}{r_1^4} + \frac{2y}{r_2^2} - \frac{4x_2^2y}{r_2^4} - 2h\left[-\frac{12x_2y}{r_2^4} + \frac{16x_2^3y}{r_2^6} + 2h\left(\frac{2y}{r_2^4} - \frac{8x_2^2y}{r_2^6}\right)\right]\right\}, \quad (8)$$

$$\sigma^d_{xy}(x, h, y) = \frac{Db}{2}\left\{-\frac{2x_1}{r_1^2} + \frac{4x_1^3}{r_1^4} + \frac{2x_2}{r_2^2} - \frac{4x_2^3}{r_2^4} - 2h\left[\frac{2}{r_2^2} - \frac{16x_2^2}{r_2^4} + \frac{16x_2^4}{r_2^6} + 2h\left(\frac{6x_2}{r_2^4} - \frac{8x_2^3}{r_2^6}\right)\right]\right\}, \quad (9)$$

где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, $x_{1,2} = x \mp h$, а $r^2_{1,2} = x^2_{1,2} + y^2$.

Координата $x_0$ головной дислокации скопления определяется соотношением $x_0 = d$. Координаты $x_k$ остальных дислокаций скопления можно рассчитать из условий равновесия $F^k_x = 0$, $(k = 1, \ldots, N)$, где $F^k_x$ — проекция на ось $x$ суммарной силы $\mathbf{F}^k$, действующей на $k$ дислокацию скопления.

Суммарная сила $F^k_x$, действующая на $k$ дислокацию, представима в виде

$$F^k_x = b\sum_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{N} \sigma^d_{xy}(x, x_j, y=0) + F^{im}_x + \tau b, \quad (10)$$

где $b$ — величина вектора Бюргерса дислокаций, а $F^{im}_x = -Db^2/x_k$ — проекция на ось $x$ силы взаимодействия $k$ дислокации с поверхностью твердого тела. В формуле (10) первое слагаемое дает проекцию силы, действующую на $k$-ую дислокацию со стороны остальных дислокаций скопления, а последнее слагаемое определяет силу, действующую на эту дислокацию со стороны сдвигового напряжения $\tau$. Подставляя формулы (9) и (10), а также выражение для силы $F^{im}_x$ в условие равновесия $F^k_x$, получаем следующую систему уравнений для определения координат $x_k$:

$$\frac{2\tau}{D} = b\sum_{\substack{j=0\\ j\neq k}} \frac{16x_j^2x_k}{(x_j - x_k)(x_j + x_k)^3} + \frac{b}{x_k}, \quad k = 1, \ldots, N. \quad (11)$$

Координаты $x_k$ дислокаций скопления рассчитываются путем численного решения системы уравнений (11).

## 4. Критические параметры образования нанотрещины

Рассчитаем теперь условия зарождения и роста нанотрещины для меди, имеющей бимодальную структуру и характеризующейся следующими значениями параметров: $G = 48$ GPa, $\nu = 0.34$, $b = 0.25$ nm и $\gamma = 1.7\,\mathrm{J/m^2}$ [29]. Анализ для случая меди показывает, что в зависимости от величины приложенного напряжения $\tau$, а также значений параметров $d$ и $\alpha$ возможны три ситуации: 1) рост трещины энергетически невыгоден ни при какой длине трещины, 2) рост трещины выгоден до достижения ей равновесной длины $l_e$ (то есть при $l < l_e$), и 3) рост трещины выгоден при любой длине трещины. В последнем случае напряжение, создаваемое дислокационным скоплением, позволяет трещине дорасти до критической (гриффитсовской) длины, при превышении которой рост трещины может тормозиться только в результате локальной пластической деформации у ее вершины.

Зависимость равновесной длины трещины $l_e$ от величины приложенного напряжения $\tau$ приведена на рис. 3 для случая $d = 600$ nm и $\alpha = 70°$. (Анализ показывает,

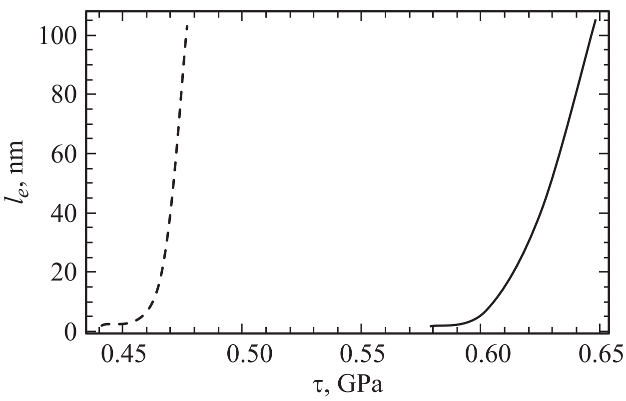


**Рис. 3.** Зависимости равновесной длины $l_c$ нанотрещины, зарождающейся на дислокационном скоплении в меди, от величины приложенного сдвигового напряжения $\tau$ для случая $d = 600$ nm и $\alpha = 70°$. Сплошная и штрихованная кривые показывают зависимости соответственно для трещины вблизи поверхности и трещины в бесконечном теле.

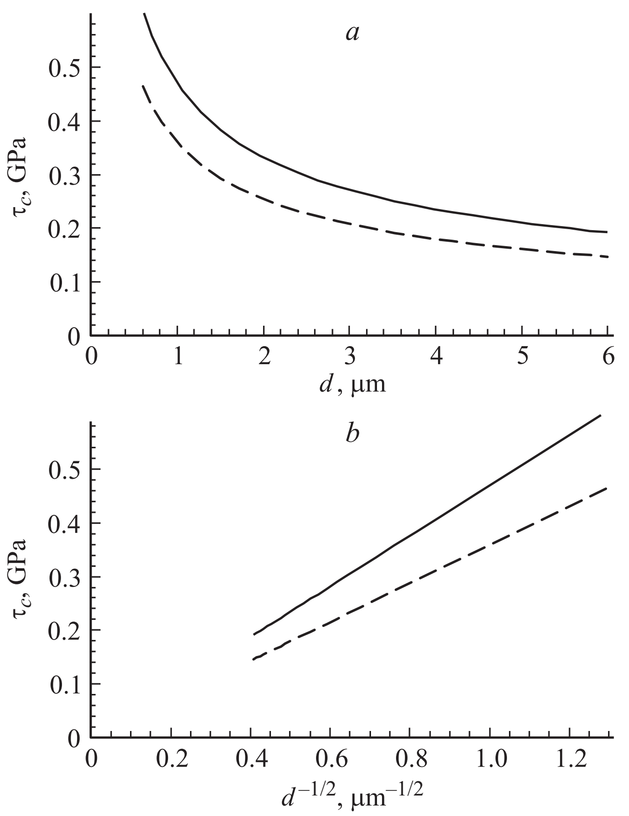


**Рис. 4.** Зависимости критического сдвигового напряжения $\tau_c$ для зарождения нанотрещины в поле напряжений дислокационного скопления от размера $d$ большого зерна ($a$) и параметра $d^{-1/2}$ ($b$). Сплошные и штрихованные кривые показывают зависимости соответственно для трещины вблизи поверхности и трещины в бесконечном твердом теле.

что угол $\alpha \approx 70°$ соответствует наиболее легкому зарождению и росту трещины.) Для сравнения на рис. 3 также представлена зависимость $l_e(\tau)$ для случая бесконечного твердого тела, рассчитанная с помощью расчетной схемы, аналогичной той, которая использовалась для расчета зависимости $l_e(\tau)$ для трещины, зарождающейся вблизи поверхности. Как видно из рис. 3, как только напряжение $\tau$ достигает значений, при которых зарождение трещины становится энергетически выгодным, равновесная длина трещины $l_e$ очень быстро растет с увеличением $\tau$. Поэтому напряжения, соответствующие моменту зарождения нанотрещины, слабо отличаются от напряжений, при которых равновесная длина трещины превышает 100 nm. Как следствие, образование трещины можно характеризовать одним критическим напряжением $\tau_c$, соответствующим некоторой заданной равновесной длине нанотрещины. Для определенности мы определим критическое напряжение $\tau_c$ как напряжение, при котором равновесная длина внутризеренной нанотрещины равна 10 nm.

Зависимости критического напряжения $\tau_c$ (для образования трещины на дислокационном скоплении вблизи поверхности) от размера зерна $d$, содержащего дислокационное скопление, в координатах $(d,\ \tau_c)$ и $(d^{-1/2},\ \tau_c)$ приведены на рис. 4, $a$ и 4, $b$ соответственно для случая $\alpha = 70°$. Для сравнения на рис. 4 также показаны соответствующие зависимости для случая бесконечного твердого тела. Рис. 4 наглядно демонстрирует, что как для трещины вблизи поверхности, так и для трещины в бесконечном твердом теле критическое напряжение $\tau_c$ уменьшается с увеличением размера $d$ большого зерна и прямо пропорционально $d^{-1/2}$. При этом наличие поверхности увеличивает значение критического напряжения $\tau_c$ примерно на 30% по сравнению со случаем бесконечного тела.

## 5. Заключение

Таким образом, в настоящей работе построена теоретическая модель, которая эффективно описывает зарождение трещин в полях напряжений дислокационных скоплений вблизи свободной поверхности в металлических наноматериалах с бимодальной структурой (рис. 2). Выявлено, что в зависимости от величины приложенного напряжения $\tau$, а также значений параметров $d$ (размер зерна, в котором сформировано дислокационное скопление) и $\alpha$ (угол между плоскостью нанотрещины и нормалью к плоскости границы зерна) возможны три ситуации: 1) рост трещины энергетически невыгоден ни при какой длине трещины, 2) рост трещины выгоден до достижения ей равновесной длины $l_e$ (то есть при $l < l_e$) и 3) рост трещины выгоден при любой длине трещины.

Рассчитаны зависимости критического напряжения $\tau_c$ (для образования трещины с равновесной длиной 10 nm на дислокационном скоплении вблизи поверхности) от размера $d$ зерна, содержащего дислокационное скопление, в координатах $(d,\ \tau_c)$ и $(d^{-1/2},\ \tau_c)$ (см. рис. 4, $a$ и $b$ соответственно) в меди для случая $\alpha = 70°$. Для сравнения на рис. 4 также показаны соответствующие зависимости для случая бесконечного твердого тела. Эти зависимости демонстрируют, что как для трещины вблизи поверхности, так и для трещины в бесконечном твердом теле критическое напряжение $\tau_c$ уменьшается с увеличением размера $d$ большого зерна и прямо пропорционально $d^{-1/2}$. При этом значение критического напряжения $\tau_c$ для зарождения трещины вблизи свободной поверхности в металлическом наноматериале с бимодальной структурой примерно на 30% выше такового для зарождения трещины внутри наноматериала в удалении от свободной поверхности.

Полученные результаты свидетельствуют о значимом влиянии свободной поверхности на зарождение трещин в металлических наноматериалах с бимодальной структурой. Таким образом, влияние свободной поверхности требует учета при описании процессов зарождения трещин и пластической деформации в металлических наноматериалах с бимодальной структурой.

## Список литературы

[1] I.A. Ovid'ko. Int. Mater. Rev. **50**, 65 (2005).
[2] M. Dao, L. Lu, R.J. Asaro, J.T.M. De Hosson, E. Ma. Acta Mater. **55**, 4041 (2007).
[3] C.S. Pande, K.P. Cooper. Progr. Mater. Sci. **54**, 689 (2009).
[4] Г.А. Малыгин. УФН **181**, 1129 (2011).
[5] Y. Estrin, A. Vinogradov. Acta Mater. **61**, 782 (2013).
[6] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications. Cambridge University Press, Cambridge (2007). 364 p.
[7] Р.Ф. Альмухаметов, Л.А. Габдрахманова, И.З. Шарипов, Я.Ф. Абзгильдин. ФТТ **56**, 224 (2014).
[8] О.А. Маслова, Ф.В. Широков, Ю.И. Юзюк, M.E. Marssi, M. Jain, N. Ortega, R.S. Katiyar. ФТТ **56**, 308 (2014).
[9] Н.В. Токий, В.В. Токий, А.Н. Пилипенко, Н.Е. Письменова. ФТТ **56**, 966 (2014).
[10] В.А. Москаленко, В.И. Бетехтин, Б.К. Кардашев, А.Г. Кадомцев, А.Р. Смирнов, Р.В. Смолянец, М.В. Нарыкова. ФТТ **56**, 1539 (2014).
[11] С.В. Бобылев, И.А. Овидько. ФТТ **57**, 2005 (2015).
[12] I.A. Ovid'ko. Science **295**, 2386 (2002).
[13] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba. Mater. Sci. Eng. A **339**, 73 (2003).
[14] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter. Acta Mater. **53**, 1 (2005).
[15] M.A. Meyers, A. Misra, D. Benson. Progr. Mater. Sci. **51**, 427 (2006).
[16] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko, A.K. Mukherjee. Scr. Mater. **60**, 36 (2009).
[17] H.A. Padilla II, B.L. Boyce. Exp. Mech. **50**, 5 (2010).
[18] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid?ko. Phys. Rev. Lett. **105**, 055 504 (2010).
[19] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.L. Wu. Progr. Mater. Sci. **57**, 1 (2012).
[20] V.L. Tellkamp, E.J. Laverbia, A. Melmed. Metall. Mater. Trans. A **32**, 2335 (2001).
[21] Y. Wang, M. Chen, F. Zhou, E. Ma. Nature **419**, 912 (2002).
[22] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Rev. Adv. Mater. Sci. **16**, 1 (2007).
[23] J.R. Greer, W.D. Nix. Phys. Rev. B **73**, 245 410 (2006).
[24] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Phys. Rev. Lett. **103**, 135 501 (2009).
[25] J.R. Greer, J.Th.M. De Hosson. Progr. Mater. Sci. **56**, 654 (2011).
[26] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Phys. Rev. Lett. **109**, 175 501 (2012).
[27] В.Л. Инденбом. ФТТ **3**, 2071 (1961).
[28] T. Mura. Advances in Materials Research / Ed. H. Herman. Interscience, N.Y. (1968). V. 3, P. 1–107.
[29] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1974). 599 с.