

07

Влияние рельефа Пайерлса на размерные эффекты при пластической деформации микро- и нанокристаллов ОЦК-металлов

© Г.А. Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: malygin.ga@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 27 октября 2011 г.)

В рамках дислокационно-кинетического подхода теоретически обсуждается влияние рельефа и напряжений Пайерлса на размерные эффекты в микро- и наноразмерных кристаллах металлов с ОЦК-решеткой. Найдено, что по сравнению с микро- и нанокристаллами с ГЦК-решеткой в ОЦК-кристаллах коэффициент n в степенном законе $\sigma \sim D^{-n}$ (где σ — напряжение течения, D — поперечный размер кристалла) тем меньше, чем больше критическая температура T_c , выше которой рельеф Пайерлса перестает контролировать движение дислокаций в ОЦК-металлах. Обсуждаются также особенности влияния рельефа Пайерлса на коэффициент скоростной чувствительности напряжений течения в микрокристаллах с ОЦК-решеткой. Теоретические результаты иллюстрируются имеющимися в литературе экспериментальными данными.

1. Введение

Размерные эффекты, возникающие при пластической деформации металлических кристаллов с поперечными размерами в микро- и нанодиапазонах, привлекают в последнее время большое внимание исследователей. Эксперименты по сжатию и растяжению кристаллов с ГЦК-решеткой (Au, Ni, Cu и др.) в виде микростолбиков, приготовленных методом травления поверхности массивного кристалла фокусированным ионным пучком (ФИП), показали [1,2], что их предел текучести σ_y и напряжения течения $\sigma(\epsilon)$ увеличиваются с уменьшением поперечного размера кристалла D в соответствии со степенным законом $\sigma_y \sim D^{-n}$, $\sigma \sim D^{-n}$, где $n = 0.6-1.0$, ϵ — величина пластической деформации.

В результате электронно-микроскопических *in situ* исследований динамики дислокаций [3,4] и ее 3D-моделирования методом дискретных дислокаций [5,6] установлено, что основным источником дислокаций в ультратонких кристаллах являются однополюсные дислокационные источники с критическими длинами L_S , зависящими от поперечного размера кристалла: $L_S = \delta_S D$, где коэффициент $\delta_S < 1/2$ зависит от исходной (до деформации) дефектности кристалла [7,8]. Однополюсные (спирального типа) источники образуются в результате отсечения [5] поверхностью кристалла части дислокационной петли, генерируемой двухполюсным источником Франка-Рида. Другим важным моментом, установленным в ходе этих исследований, является существенная роль поверхности кристалла как стока для дислокаций [2-5] или, наоборот, барьера для них при наличии на его поверхности достаточно прочной пленки [9,10].

Кроме этих основных фактов и закономерностей в последнее время был обнаружен ряд новых размерных эффектов. Так, при пластической деформации круглых образцов нанокристаллического Ni с размером

зерен 60 nm было найдено сильное (примерно вдвое) снижение величины их предела текучести при утончении образцов от 2.5 μm до 165 nm [11]. В [12] при растяжении микрокристаллов меди толщиной $D = 1.5 \mu\text{m}$, полученных методом ФИП, была зафиксирована сильная чувствительность их предела текучести и напряжений течения к отношению рабочей длины образца L к размеру его сечения D (aspect ratio, $R = L/D$). Оказалось, что при снижении величины R с 5 до 1 предел текучести и напряжения течения возрастают в несколько раз.

Еще одно обстоятельство, теоретическому анализу которого посвящена настоящая работа, связано с обнаруженной в [13] в микрокристаллах с ОЦК-решеткой (Nb, Ta, Mo, W) корреляцией показателя степени n в соотношениях $\sigma_y \sim D^{-n}$ с критической температурой T_c , при которой напряжение Пайерлса в ОЦК-металлах обращается в нуль. Оказалось, что с ростом этой температуры показатель степени n уменьшается от характерных для кристаллов с ГЦК-решеткой значений $n = 0.6-1.0$ до 0.2-0.5 [13-15]. Аналогичные редуцированные значения этого показателя в различных ОЦК-кристаллах зафиксированы также в [16-21]. Показатель степени n является индикатором степени размерного упрочнения кристалла и может быть назван коэффициентом размерного упрочнения: чем он больше, тем больше это упрочнение.

Кроме того, требует обсуждения зависимость коэффициентов скоростной чувствительности (СЧ) предела текучести $m_y = d \ln \sigma_y / d \ln \dot{\epsilon}$ и напряжений течения $m = d \ln \sigma / d \ln \dot{\epsilon}$ в наноразмерных (НР) и микро-размерных (МР) кристаллах с ОЦК-решеткой от размера их поперечного сечения D ($\dot{\epsilon}$ — скорость пластической деформации). Имеющиеся немногочисленные пока данные [14,15] позволяют заключить, что эти зависимости отличаются от соответствующих зависимостей для микро- и нанокристаллов металлов с ГЦК-решеткой [22].

Указанные особенности влияния размерного фактора на прочностные свойства микрорешетчатых кристаллов с ОЦК-решеткой являются, как можно предполагать [15,22], результатом влияния решеточного рельефа Пайерлса на размерные эффекты в этих кристаллах. Косвенным подтверждением этого служит то, что, например, зависимости коэффициентов СЧ предела текучести m_y в нанокристаллических образцах ГЦК- и ОЦК-металлов от размера кристаллитов d имеют противоположный характер. Если в ГЦК-металлах этот коэффициент с измельчением зерен сильно возрастает [23,24], то в нанокристаллических металлах с ОЦК-решеткой он, наоборот, сильно снижается [25]. Теоретический анализ этих зависимостей в рамках дислокационно-кинетического подхода позволил установить [7,24,26], что такой аномальный по сравнению с ГЦК-металлами характер зависимостей $m(d)$ в металлах с ОЦК-решеткой связан с тем, что по мере уменьшения размера зерен активационный объем (активационная длина) начинает определять не критический размер перегибов L_c на движущихся в рельефе Пайерлса дислокациях, а размер зерна d .

Можно предполагать, что и в случае нано- и микрорешетчатых ОЦК-металлов соотношение размера кристалла D (точнее, активационных длин однополюсных источников $L_S = \delta_S D$) и перегибов L_c должно влиять на коэффициент размерного упрочнения n и коэффициент СЧ m их напряжений течения. Теоретический анализ этих вопросов и является целью настоящей работы.

Как и в случае размерных эффектов в образцах ГЦК-металлов [7,8,24,26,27], этот анализ базируется на кинетическом уравнении для плотности дислокаций в пластически деформируемых МР- и НР-образцах ОЦК-металлов. Дислокационно-кинетический подход позволяет учитывать влияние различных структурных факторов, в том числе размерного (D) и решеточного (рельеф Пайерлса), на дислокационно-кинетические процессы, протекающие в них при пластической деформации.

2. Основные уравнения и соотношения

Кинетическое уравнение для плотности дислокаций ρ в микро- или наноразмерном кристалле с учетом размерного фактора D имеет в общем случае вид [7,8,27]

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{n_S u}{L_S} - \frac{\beta_S}{D} u \rho + \delta_f u \rho^{3/2} - h_a u \rho^2, \quad (1)$$

где t — время, u — скорость дислокаций, n_S — плотность приповерхностных однополюсных источников дислокаций, $L_S = \delta_S D$ — длина однополюсного источника, равная расстоянию от точки его закрепления внутри кристалла до поверхности кристалла. Второе слагаемое в правой части (1) определяет скорость ухода генерируемых источниками дислокаций через поверхность кристалла, $\beta_S \approx 2-4$ — геометрический коэффициент, зависящий от формы поперечного сечения кристалла и угла между осью нагружения кристалла и нормалью к

плоскости скольжения дислокаций. Остальные два члена в правой части уравнения (1) описывают соответственно скорость размножения дислокаций на дислокациях леса (коэффициент $\delta_f \approx 10^{-2}$) и аннигиляцию винтовых участков дислокационных петель поперечным скольжением, h_a — характерное расстояние аннигиляции.

При пластической деформации микрорешетчатых кристаллов с постоянной скоростью производную от плотности дислокаций по времени в левой части (1) можно преобразовать к виду $d\rho/dt = (d\rho/d\gamma)\dot{\gamma}$, где γ и $\dot{\gamma} = b\rho u$ — соответственно величина и скорость сдвиговой деформации, \mathbf{b} — вектор Бюргерса. После подстановки производной $d\rho/dt$ в (1) получаем уравнение для анализа эволюции плотности дислокаций с ростом деформации сдвига

$$\rho \frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{n_S}{bL_S} - \frac{\beta_S}{bD} \rho + k_f \rho^{3/2} - k_a \rho^2, \quad (2)$$

где $k_f = \delta_f/b$, $k_a = h_a/b$ — коэффициент аннигиляции дислокаций. В кристалле с большим поперечным сечением ($D > 10 \mu\text{m}$) первые два члена в правой части (2) вносят незначительный вклад в эволюцию плотности дислокаций, в результате чего уравнение (2) превращается в известное уравнение Кокса–Мекинга [28] $d\rho/d\gamma = k_f \rho^{1/2} - k_a \rho$, описывающее эволюцию плотности дислокаций в крупноразмерных моно- и поликристаллических образцах ГЦК-металлов [29]. В кристаллах с поперечными размерами $D < 1-10 \mu\text{m}$ в (2) начинают доминировать процессы эмиссии дислокаций из поверхностных дислокационных источников и выход дислокаций из кристалла через его поверхность. В результате вместо (2) имеем уравнение [7,8,27]

$$\rho \frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{n_S}{bL_S} - \frac{\beta_S}{bD} \rho, \quad (3)$$

описывающее эволюцию плотности дислокаций в микро- и наноразмерных ГЦК-кристаллах.

Как было отмечено выше, можно предполагать, что в микрорешетчатых кристаллах с ОЦК-решеткой соотношение длины однополюсного дислокационного источника $L_S = \delta_S D$ и критического размера парного перегиба L_c может быть причиной более низких значений показателя степени n в соотношениях $\sigma_y \sim D^{-n}$ по сравнению с ГЦК-металлами. Действительно, если в сверхтонком кристалле активационная длина однополюсного источника L_S оказывается меньше критического размера парного перегиба L_c , то она будет определять активационную длину источника. В промежуточных случаях, $L_S \approx L_c$, активационная длина определяется эффективным размером

$$L_{\text{ef}} = (L_S^{-1} + L_c^{-1})^{-1} = L_S(1 + L_S/L_c)^{-1}. \quad (4)$$

Подставляя L_{ef} и плотность однополюсных источников $n_S = 2/L_S^2$ [8] в первое слагаемое в правой части уравнения (3), получаем уравнение

$$\rho \frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{2}{bL_S^3} \left(1 + \frac{L_S}{L_c}\right) - \frac{\beta_S}{bD} \rho, \quad (5)$$

которое использовано далее (раздел 3) для анализа влияния размерного фактора D и рельефа Пайерлса на коэф-

коэффициент размерного упрочнения n НР- и МР-кристаллов с ОЦК-решеткой, а также на коэффициент СЧ их напряжений течения m .

Для осуществления этого анализа необходимо знать количественную связь критического размера парного перегиба L_c с критической температурой T_c , при достижении которой напряжение Пайерлса перестает контролировать движение дислокаций в ОЦК-металлах. Для этой цели воспользуемся моделью жестких перегибов [30,31] и уравнением энергетического баланса, контролирующим образование перегибов на дислокациях, перемещающихся по рельефу Пайерлса,

$$H(L, \tau) = 2H_c - \Phi_0 \frac{a}{L} - abL\tau, \quad (6)$$

где

$$\Phi_0 = \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \frac{\mu b^2 a}{2\pi},$$

$2H_c$ — собственная энергия образования парного перегиба, a — расстояние между канавками пайерлсовского рельефа, L — текущий размер перегиба, Φ_0 — постоянная, определяющая энергию взаимодействия перегибов, τ — напряжение, действующее на дислокацию. Минимизируя энергию H относительно длины перегиба L , находим зависимость размера критического перегиба L_c от напряжения τ и энергию его образования

$$L_c = L_0 \left(\frac{\tau_p^0}{\tau} \right)^{1/2}, \quad H(\tau) = 2H_c \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_p^0} \right)^{1/2} \right], \quad (7)$$

где $\tau_p^0 = H_c^2/a^2 b \Phi_0$ — напряжение, при котором энергия образования перегиба критического размера обращается в нуль, а размер перегиба достигает минимальной величины $L_0 = (\Phi_0/H_c)a$.

Используя далее соотношение Аррениуса для скорости термоактивированной пластической деформации $H(\tau) = k_B T \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon})$, где k_B — постоянная Больцмана, $\dot{\epsilon}_0$ — предэкспоненциальный множитель, находим зависимость напряжения Пайерлса и критического размера перегиба от критической температуры T_c и температуры опыта T

$$\tau_p = \tau_p^0 (1 - T/T_c)^2, \quad L_c = \frac{L_0}{1 - T/T_c},$$

$$T_c = \frac{2H_c}{k_B \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon})}. \quad (8)$$

Приведем также температурную зависимость коэффициента СЧ напряжений Пайерлса

$$m_p = \frac{d \ln \tau_p}{d \ln \dot{\epsilon}} = m_c \frac{T/T_c}{1 - T/T_c},$$

$$m_c = \frac{k_B T_c}{H_c} = 2 / \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon}), \quad (9)$$

она понадобится при анализе экспериментальных данных в следующем разделе.

Еще одним обстоятельством, которое может влиять на прочностные характеристики наноразмерных ОЦК-кристаллов, является модифицирующее действие размерного фактора на напряжение Пайерлса, когда размер дислокационных источников $L_S = \delta_S D$ становится сопоставимым с размером критических перегибов L_c . Для учета этого обстоятельства запишем напряжение Пайерлса, принимая во внимание второе соотношение (8), в следующем альтернативном виде: $\tau_p = \tau_p^0 (L_0/L_c)^2$. При $L_S \approx L_c$ напряжение Пайерлса будет контролироваться эффективным размером критического перегиба $L_{ef} = (1/L_c + 1/L_S)^{-1}$. Подставляя его вместо L_c в альтернативную запись напряжения Пайерлса, получаем модифицированную форму этого напряжения

$$\tau_{pD}(T, L_S) = \tau_p(T) (1 + L_c/L_S)^2. \quad (10)$$

Она будет использована в следующем разделе при обсуждении экспериментальных данных.

3. Особенности размерных эффектов в микро- и наноразмерных ОЦК-кристаллах

Размерные эффекты имеют место в микро- и нанокристаллах как с ОЦК-, так и с ГЦК-решеткой. В настоящем разделе акцент сделан на особенностях этих эффектов в кристаллах с ОЦК-решеткой в области температур $T < T_c$, где на динамику и кинетику дислокаций в кристаллах оказывает влияние решеточный рельеф Пайерлса.

Как показывают электронно-микроскопические *in situ* исследования начальной стадии деформации ГЦК-микрокристаллов [3,4] и результаты ее 3D-моделирования методом дискретных дислокаций [5,6], содержащиеся в приповерхностных слоях исходного (до деформации) кристалла дефекты в виде призматических петель в результате их взаимодействия с подвижными дислокациями превращаются в скользящие дислокации. Большая часть этих дислокаций уходит из кристалла через его поверхность (dislocation mechanical annealing [3,4]), а меньшая — образует однополюсные источники с критическими длинами L_S , зависящими от поперечного размера кристалла D . Генерация этими источниками дислокаций, описываемая уравнениями (3) и (5), увеличивает плотность дислокаций ρ , сосредоточенных в однополюсных источниках, и уменьшает их критические длины $l_p = \rho^{-1/2}$. Результатом этого является рост критического напряжения эмиссии дислокаций источниками

$$\tau = (\mu b / 2\pi l_p) \ln(l_p/b) = \alpha \mu b \rho^{1/2}, \quad (11)$$

где $\alpha = (\ln(l_p/b))/2\pi \approx 0.5 - 1.0$. Это означает, что в процессе пластической деформации дислокационные источники испытывают деформационное упрочнение (dislocation source strain-hardening).

3.1. Кривые напряжение – деформация НР- и МР-кристаллов. Чтобы установить, как деформация и размер кристалла влияют на деформационное упрочнение дислокационных источников, необходимо решить уравнение (5). Решая его и учитывая, что, согласно (11), $\rho = (\tau/\alpha\mu b)^2$, получаем зависимость напряжения τ от деформации γ в неявном виде

$$\gamma = -\gamma_D \left[(\tau/\tau_{DS})^2 + \ln \left(1 - (\tau/\tau_{DS})^2 \right) \right], \quad (12a)$$

где τ_{DS} — напряжение, соответствующее равновесию между процессами генерации дислокаций из источников и их уходом из кристалла через его поверхность (плато на кривых σ – e на рис. 1), γ_D — деформация, определяющая продолжительность стадии деформационного упрочнения нанокристалла, т.е. стадии деформационного упрочнения дислокационных источников, при этом

$$\tau_{DS} = \alpha\mu \left(\frac{2}{\beta_S \delta_S} \right)^{1/2} \left(\frac{b}{L_S} \right) \left(1 + \frac{L_S}{L_c} \right)^{1/2}, \quad (12b)$$

$$\gamma_D = \left(\frac{2^{1/2}}{\beta_S \delta_S} \right)^2 \left(\frac{b}{L_S} \right) \left(1 + \frac{L_S}{L_c} \right). \quad (12c)$$

Видно, что оба эти параметра зависят от поперечного размера кристалла D , поскольку $L_S = \delta_S D$, а также, согласно (8), от температуры и скорости деформации.

Из уравнения (12a) следует, что на начальной стадии деформации, когда $\gamma \ll \gamma_D$ и в уравнении (5) доминирует первое слагаемое в правой его части, зависимость напряжения $\sigma = \tau/m_{Sm}$ от деформации $\varepsilon = m_{Sm}\gamma$ имеет вид

$$\sigma_y = \sigma_{PD} + m_{Sm}^{-5/4} \alpha\mu \left(\frac{2^{2/3} b}{L_S} \right)^{3/4} \left(1 + \frac{L_S}{L_c} \right)^{1/4} \varepsilon^{1/4}, \quad (13)$$

где $\sigma_{PD} = \tau_{PD} = \tau_{PD}/m_{Sm}$, m_{Sm} — фактор Шмида. Индекс y указывает на близкий к пределу текучести этап деформации кристалла. При деформациях $\varepsilon \gg \varepsilon_y$ первым слагаемым в квадратных скобках в правой части уравнения (12a) можно пренебречь; хорошим приближением для напряжения σ в этом случае является выражение

$$\sigma = \sigma_{PD} + \sigma_{DS} \left[1 - \exp(-\varepsilon/\varepsilon_D) \right]^{1/2}, \quad (14)$$

где $\sigma_{DS} = \tau_{DS}/m_{Sm}$, $\varepsilon_D = m_{Sm}\gamma_D$.

На рис. 1 приведены результаты расчета согласно (14) кривых σ – e при одноосной деформации микросталлов Мо разного поперечного размера D ,

Значения параметров рельефа и напряжений Пайерлса в Мо, а также параметров δ_S , α и β_S , характеризующих дислокационный ансамбль в микросталлах Мо

$2H_c, eV$	L_0, nm	τ_p^0, MPa	T_c, K	m_c	δ_S	α	β_S
1.3 [32]	4	810 [32]	480 [13]	0.063	0.25	0.55	4

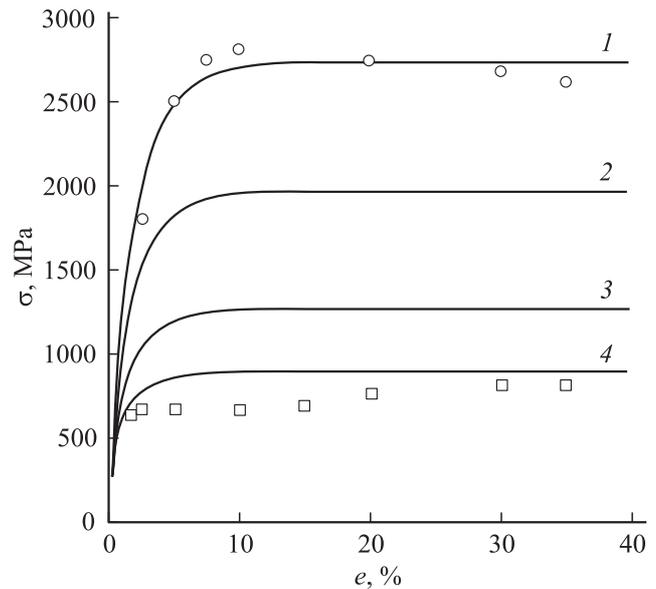


Рис. 1. Кривые деформационного упрочнения микросталлов Мо с различным поперечным сечением D (расчет согласно уравнению (14)): 350 (1), 700 (2), $2 \cdot 10^3$ (3) и $5 \cdot 10^3$ nm (4). Экспериментальные точки — значения напряжений течений при $D = 350$ и $5 \cdot 10^3$ nm [15].

где $e = \varepsilon + \sigma/E$ — полная (включающая упругую и пластическую) деформация кристалла, $m_{Sm} = 0.41$, $E = 210$ GPa — модуль Юнга. Расчет осуществлялся с учетом данных [15] по сжатию микросталлов Мо при указанных в таблице параметрах рельефа ($2H_c$, L_0) и напряжений (τ_p^0 , T_c , m_c) Пайерлса в молибдене при температуре опыта $T = 298$ K, $\mu = 137$ GPa, $b = 0.27$ nm; значения параметров δ_S , α и β_S также приведены в таблице. Обращает на себя внимание то, что по мере утончения кристалла продолжительность стадии деформационного упрочнения возрастает, согласно (12c), как $\varepsilon_D = m_{Sm}\gamma_D \sim 1/D$, что характерно для деформации НР- и МР-кристаллов как с ГЦК-, так и ОЦК-решеткой. Экспериментальные точки (данные [15]) иллюстрируют степень соответствия теории и эксперимента.

3.2. Коэффициент размерного упрочнения. Экспериментально коэффициент размерного упрочнения $n = -d \ln \sigma / d \ln D$ определяют из наклона кривых σ – D в двойных логарифмических координатах при фиксированной величине деформации ε . В экспериментах с МР- и НР-кристаллами в качестве таковой используют как деформацию $\varepsilon_y = 0.2\%$ [14], определяющую условный предел текучести σ_y кристалла, так и деформации $\varepsilon = 2.5, 5$ и 8% [14, 15].

На рис. 2, а приведены данные по корреляции коэффициентов n с критической температурой T_c в микросталлах W, Mo, Ta, Nb [13–15] и V [20] при температуре опыта 298 K и деформациях $\varepsilon = 2.5$ [13], 5 [15], 8 [14] и 2% [20]. Видно, что 1) эта корреляция действительно существует: чем выше температура T_c , тем ниже коэффициент размерного упрочнения соответствующего

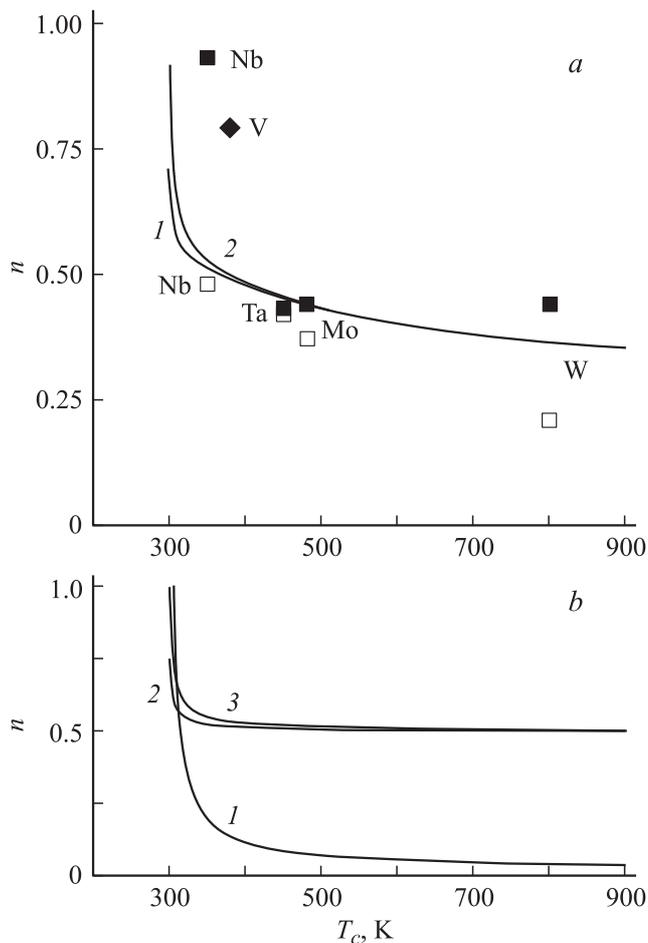


Рис. 2. а) Корреляция коэффициента размерного упрочнения n микрокристаллов с ОЦК-решеткой (указаны на рисунке) с величиной их критической температуры T_c . Темные квадраты — данные [14], светлые квадраты — [13,15], ромб — [20]. 1 и 2 — расчет коэффициентов n_y и n_D согласно соотношениям (15) и (16). б) Результаты расчета зависимости парциальных коэффициентов от температуры T_c согласно соотношениям (15b) и (16): 1 — n_{PD} , 2 — n_y , 3 — n_{DS} .

микрокристалла; 2) коэффициенты n в кристаллах с наиболее высокими критическими температурами (Ta, Mo, W) располагаются ниже диапазона коэффициентов $n = 0.6-1.0$, характерного для ГЦК-кристаллов. Для кристаллов Nb и V, имеющих низкие напряжения Пайерлса, поскольку их критические температуры T_c близки к температуре опыта T , коэффициенты находятся в типичном для ГЦК-кристаллов интервале значений $n = 0.6-1.0$.

Анализ корреляции между коэффициентами n и критическими температурами T_c в ОЦК-микрокристаллах проведем, используя для этой цели напряжения (12b) и (13). В результате для коэффициентов размерного упрочнения получаем соответственно соотношения

$$n_y = \frac{n_{PD}\sigma_{PD} + n_y(\sigma_y - \sigma_{PD})}{\sigma_y}, \quad (15a)$$

где

$$n_{PD} = -\frac{d \ln \sigma_{PD}}{d \ln D} = \frac{2}{1 + L_s/S_c},$$

$$n_y = \frac{d \ln(\sigma - \sigma_{PD})}{d \ln D} = \frac{3}{4} - \frac{1}{4} \frac{1}{1 + L_c/L_s}, \quad (15b)$$

и

$$n_D = \frac{n_{PD}\sigma_{PD} + n_{DS}\sigma_{DS}}{\sigma_{PD} + \sigma_{DS}},$$

$$n_{DS} = -\frac{d \ln \sigma_{DS}}{d \ln D} = 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{1 + L_c/L_s}. \quad (16)$$

Из уравнений (15) и (16) видно, что в ОЦК-микрокристаллах при $T < T_c$ коэффициенты n_y и n_{DS} меньше, чем в случае ГЦК-образцов: $n_y = 3/4$ и $n_{DS} = 1.0$.

Кривые 1 и 2 на рис. 2, а рассчитаны согласно соотношениям (15) и (16) при $T = 298$ К при среднем для экспериментального интервала $0.3-5 \mu\text{m}$ размере кристалла $D = 1 \mu\text{m}$, $\varepsilon = 2.5\%$ и указанных в таблице значениях параметров для кристаллов Mo. Несмотря на то что значения параметров для других ОЦК-металлов отличаются от приведенных в таблице для Mo, видно, что в целом теоретические результаты согласуются с экспериментом. На рис. 2, б показаны результаты расчета согласно (15b) и (16) парциальных коэффициентов размерного упрочнения n_y , n_{PD} и n_{DS} , вносящих вклад в полные коэффициенты размерного упрочнения n_y и n_D . Видно, что коэффициент n_{PD} , связанный с зависимостью напряжения Пайерлса от D , вносит при $T \ll T_c$ несущественный вклад в коэффициенты n_y и n_D .

Из соотношений (15b) и (16) следует также, что при размерах ОЦК-микрокристаллов $D \ll D_0/(1 - T/T_c)$

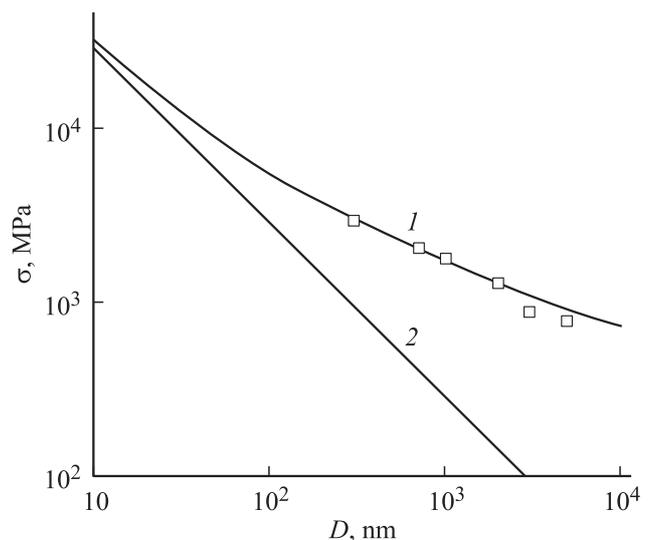


Рис. 3. Зависимость напряжения течения микрокристаллов Mo при величине деформации $\varepsilon = 10\%$ от размера их поперечного сечения D [15]. Расчет напряжения $\sigma_{PD} + \sigma_{DS}$ с учетом соотношений (8), (10), (12b) и (14) при наличии (1) и в отсутствие (2) рельефа Пайерлса (см. текст).

(в Mo $D_0 = L_0/\delta_S = 16 \text{ nm}$, $D < 48 \text{ nm}$) зависимость коэффициентов n_y и n_{DS} от D приобретает вид

$$n_y \approx \frac{3}{4} - \frac{1}{4} \left[\frac{D}{D_0} (1 - T/T_c) \right],$$

$$n_{DS} \approx 1 - \frac{1}{2} \left[\frac{D}{D_0} (1 - T/T_c) \right]. \quad (17)$$

Из соотношений (17) видно, что при сильном уменьшении размера ОЦК-микросталла коэффициенты его размерного упрочнения приближаются к значениям 3/4 и 1.0, характерным для ГЦК-микросталлов. Это проиллюстрировано на рис. 3. Экспериментальные точки на этом рисунке показывают зависимость напряжения течения σ от D в микросталлах Mo [15] при $\varepsilon = 10\%$. Кривая 1 на этом рисунке демонстрирует результаты расчета напряжений $\sigma_P + \sigma_{DS}$ согласно уравнениям (8), (10), (12b) и (14) при $\varepsilon \gg \varepsilon_D \approx 1\%$ а кривая 2 — результаты расчета по тем же уравнениям напряжений течения при $T = T_c$, т.е. в отсутствие рельефа и напряжения Пайерлса. Видно, что при $D < 100 \text{ nm}$ кривая 1 приближается к прямой 2 с коэффициентом размерного упрочнения $n_D = 1$, характерным для ГЦК-микросталлов при деформациях $\varepsilon \gg \varepsilon_D$ [7,27]. Впервые на факт сближения этих зависимостей было обращено внимание в [15].

3.3. Коэффициент скоростной чувствительности напряжений течения. В настоящее время в литературе имеются всего три работы, где определялись скоростная чувствительность $d\tau/d \ln \dot{\varepsilon}$ и коэффициент СЧ $m = \frac{d \ln \tau}{d \ln \dot{\varepsilon}}$ напряжений течения. Одна работа посвящена НР-кристаллам Cu [22] и две другие — НР-кристаллам Mo [14,15]. На рис. 4 приведены данные по зависимости от D коэффициента СЧ напряжений течения в нанокристаллах Cu [22] и коэффициента СЧ предела текучести в нанокристаллах Mo [14,15]. Видно, что эти зависимости отличаются друг от друга. В случае меди имеет место сильное снижение коэффициента m с ростом размера кристалла, а в нанокристаллах молибдена с ростом размера нанокристалла такого резкого снижения не наблюдается, по крайней мере в диапазоне размеров $D > 200 \text{ nm}$.

Согласно [22], большая величина коэффициента $m = 0.12$ для напряжений течения ($\varepsilon = 10\%$) в меди при $D < 100 \text{ nm}$ (рис. 4) связана с термоактивированным зарождением петель дислокаций на поверхности нанокристалла, а более низкие значения этого коэффициента $m = 0.02$ при $D > 100 \text{ nm}$ — с взаимодействием дислокаций друг с другом. Из данных [22] следует, что в нанокристаллах меди при $D > 100 \text{ nm}$ зависимость активационных объемов V от D может быть описана уравнением

$$\frac{V}{b^3} = k_V \frac{D}{b}, \quad (18)$$

где $k_V = 0.034$ — коэффициент пропорциональности. В [7] при анализе напряжений течения ($\varepsilon > 5\text{--}10\%$) нанокристаллов металлов с ГЦК-решеткой (Au, Ag, Ni

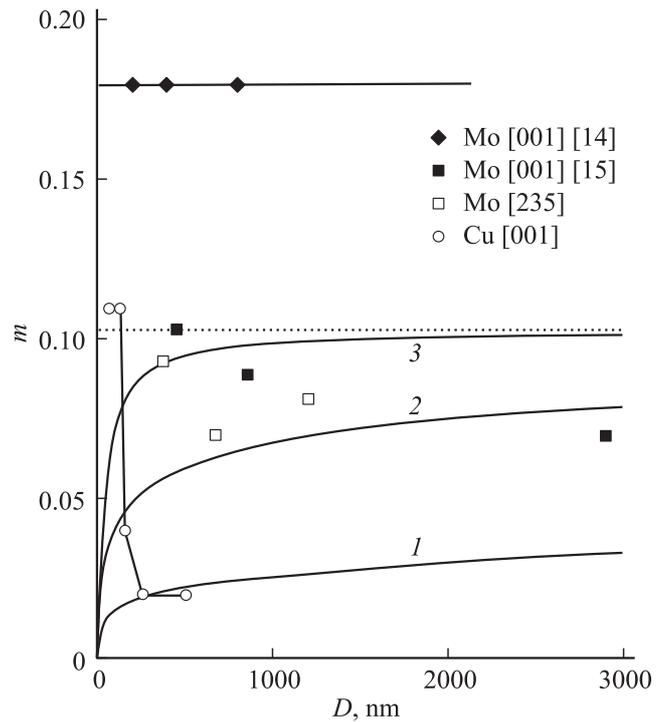


Рис. 4. Зависимость коэффициентов скоростной чувствительности напряжений m в нанокристаллах Cu[001] [22], Mo[001] [14,15] и Mo[235] [15] от размера их поперечного сечения D . Кривые — расчет коэффициента скоростной чувствительности Mo[001] m_y согласно уравнениям (22) при величине пластической деформации $\varepsilon = 2.5$ (1), $2.5 \cdot 10^{-4}$ (2) и 0% (3).

и Cu) найдено, что напряжения течения в них подчиняются соотношению $\tau(D) = k_{fl}(b/D)\mu$, где коэффициент $k_{fl} \approx 11\text{--}13$ изменяется в узких пределах. Принимая во внимание, что для коэффициента СЧ существует известное соотношение $m = k_B T / V \tau$, получаем после подстановки в него напряжения $\tau(D)$ и активационного объема $V(D)$ теоретическую оценку коэффициента k_V

$$k_V = \frac{1}{m k_{fl}} \left(\frac{k_B T}{\mu b^3} \right). \quad (19)$$

При $m = 0.02$, $k_{fl} = 13$ [7], $\mu = 48 \text{ GPa}$, $k_B T = 1/40$ и $\mu b^3 = 5 \text{ eV}$ из (19) следует оценка $k_V \approx 0.02$, близкая по величине к коэффициенту k_V в уравнении (18).

Что касается нанокристаллов Mo, то из результатов [14] по сжатию их вдоль направления [100] следует, что зависимость их предела текучести от D при 298 К и $\varepsilon = 0.2\%$ может быть описана уравнением

$$\tau_y = \tau_P + k_y \left(\frac{b}{D} \right) \mu, \quad (20)$$

где $k_y = 4.6$, τ_y и $\tau_P = 117 \text{ MPa}$ — напряжение сдвига и напряжение Пайерлса в плоскости скольжения дислокаций ($m_{Sm} = 0.41$). На рис. 5 приведены зависимость СЧ напряжений τ_y [14] от D и соответствующая ей, согласно

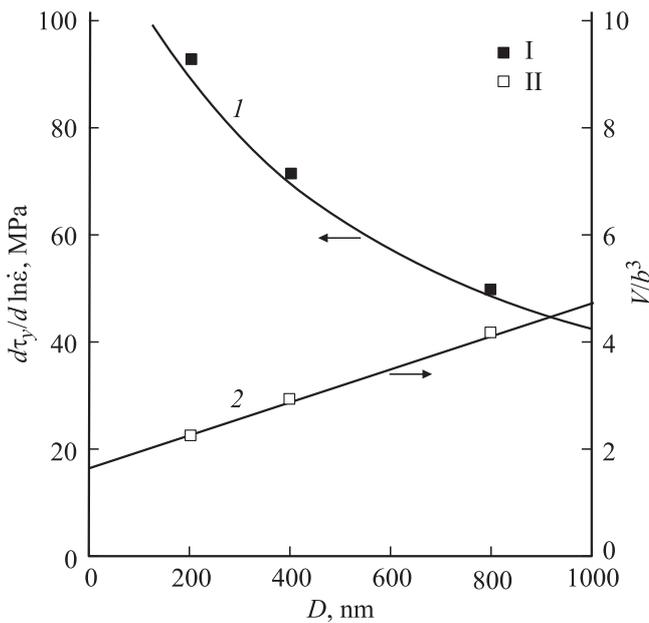


Рис. 5. Зависимость скоростной чувствительности предела текучести $d\tau_y/d \ln \dot{\epsilon}$ и активационного объема V в Мо [001] от размера его поперечного сечения D [14].

соотношению $V = k_B T / (d\tau_y/d \ln \dot{\epsilon})$, зависимость от D активационного объема V (II). Последняя, как видно из рисунка (кривая 2), может быть описана выражением, аналогичным уравнению (18),

$$\frac{V}{b^3} = 1.7 + k_V \frac{D}{b} \quad (21)$$

с коэффициентом $k_V = 0.84 \cdot 10^{-3}$, меньшим, чем в меди. Расчет коэффициента k_V для Мо по формуле (19) дает при $m = 0.18$ (рис. 4), $k_{fl} = 4.6$ и $\mu b^3 = 16.8 \text{ eV}$ значение $k_V = 1.8 \cdot 10^{-3}$ того же порядка, что и наблюдаемое в эксперименте. Кривая 1 на рис. 5 иллюстрирует результат расчета СЧ напряжения τ_y согласно соотношению $d\tau_y/d \ln \dot{\epsilon} = k_B T / V(D)$, где зависимость V от D определяется уравнением (21).

Таким образом, из результатов [14] следует, что предел текучести и СЧ предела текучести нанокристаллов Мо зависят от их поперечного размера, но коэффициент СЧ m от него не зависит. В верхней части рис. 4 приведены результаты обработки данных [14] по скоростной зависимости предела текучести кристаллов Мо в координатах $\lg \sigma - \lg \dot{\epsilon}$, из которых это хорошо видно. Коэффициенты m в [15] также определялись из наклона графиков $\lg \sigma - \lg \dot{\epsilon}$. Их значения для нанокристаллов Мо [001] и Мо [235] также показаны на рис. 4. Из-за разброса экспериментальных точек в этом случае нельзя однозначно установить степень зависимости или независимости коэффициента m от размера нанокристалла. По сведениям авторов [15], в массивных кристаллах Мо коэффициент m равен 0.085, что свидетельствует в пользу независимости его от D в НР-образцах молибдена, по крайней мере в диапазоне размеров $D > 200 \text{ nm}$.

Остается непонятной причина сильного расхождения значений коэффициентов $m = 0.18$ и ≈ 0.08 в Мо [001] в [14] и [15].

В рамках дислокационно-кинетического анализа влияния размерного фактора на прочностные и деформационные параметры ОЦК-нанокристаллов СЧ предела текучести σ_y и напряжений $\sigma_{PD} + \sigma_{DS}$, соответствующих плато на кривых на рис. 1, определяется зависимостью критической температуры T_c от скорости деформации $\dot{\epsilon}$ (8). В результате для скоростных коэффициентов получаем соотношения, аналогичные по форме соотношениям (15) и (16) для коэффициента размерного упрочнения,

$$m_Y = \frac{m_{PD}\sigma_{PD} + m_Y(\sigma_y - \sigma_{PD})}{\sigma_y}, \quad (22a)$$

где

$$m_{PD} = \frac{d \ln \sigma_{PD}}{d \ln \dot{\epsilon}} = \frac{m_P}{1 + L_c/L_S},$$

$$m_Y = \frac{d \ln (\sigma_y - \sigma_{PD})}{d \ln \dot{\epsilon}} = \frac{1}{8} \frac{m_P}{1 + L_c/L_S}, \quad (22b)$$

и

$$m_D = \frac{m_{PD}\sigma_{PD} + m_{DS}\sigma_{DS}}{\sigma_{PD} + \sigma_{DS}},$$

$$m_{DS} = \frac{d \ln \sigma_{DS}}{d \ln \dot{\epsilon}} = \frac{1}{4} \frac{m_P}{1 + L_c/L_S}. \quad (23)$$

Из этих соотношений видно, что как полные (m_Y, m_D), так и парциальные (m_{PD}, m_Y, m_{DS}) коэффициенты СЧ меньше по величине коэффициента m_P в массивном кристалле Мо. На рис. 4 показаны результаты расчета коэффициента m_Y согласно соотношениям (22) при значениях деформации $\epsilon = 2.5\%$ (кривая 1), $2.5 \cdot 10^{-4}\%$ (кривая 2) и 0% (кривая 3). Очевидно, что в последнем случае $m_Y \equiv m_{PD}$. Сравнение расчетной величины m_Y (кривая 1) с экспериментальными значениями этого коэффициента при $\epsilon = 2.5\%$, представленными на том же рисунке, показывает плохое их количественное согласие. Лучшее соответствие теории и эксперимента наблюдается при малых значениях деформации (кривые 2 и 3).

4. Заключение

Таким образом, результаты работы показывают, что особенности размерных эффектов в ОЦК-нанокристаллах по сравнению с ГЦК-нанокристаллами обусловлены наличием в металлах с ОЦК-решеткой при температурах $T < T_c$ рельефа и напряжений Пайерлса. Об этом свидетельствует зависимость коэффициента наноразмерного упрочнения ОЦК-нанокристаллов n от величины критической температуры T_c . Менее определенные результаты получены при анализе в рамках дислокационно-кинетического подхода характера связи между величиной коэффициента скоростной чувствительности напряжений течения m и поперечным размером ОЦК-нанокристаллов. Для выяснения этого вопроса требуются более систематические экспериментальные данные, чем

имеющиеся в настоящее время в литературе. Особенно важным представляется расширение исследований на диапазон размеров $D < 200$ nm, где, согласно теории, коэффициент скоростной чувствительности напряжений должен существенно зависеть от размера ОЦК-кристалла.

Список литературы

- [1] M.D. Uchic, P.A. Shade, D.M. Dimiduk. *Ann. Rev. Mater. Res.* **39**, 361 (2009).
- [2] J.R. Greer, J.T. De Hosson. *Progr. Mater. Sci.* **56**, 654 (2011).
- [3] S.H. Oh, M. Legros, D. Kiener, G. Dehm. *Nature Mater.* **8**, 95 (2009).
- [4] D. Kiener, A.M. Minor. *Acta Mater.* **59**, 1328 (2011).
- [5] S.I. Rao, D.M. Dimiduk, M. Tang, M.D. Uchic, T.A. Parthasarathy, C. Woodward. *Phil. Mag.* **87**, 4777 (2007).
- [6] K.S. Ngan, A.H. Ngan. *Scripta Mater.* **59**, 796 (2008).
- [7] Г.А. Малыгин. *УФН* **181**, 1129 (2011).
- [8] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **54**, 523 (2012).
- [9] K.S. Ngan, A.H. Ngan. *Acta Mater.* **57**, 4902 (2009).
- [10] C. Zhou, S.B. Biner, R. Le Sar. *Scripta Mater.* **63**, 1096 (2010).
- [11] D. Jang, J.R. Greer. *Scripta Mater.* **64**, 77 (2011).
- [12] D. Kiener, W. Grossinger, G. Dehm, R. Rippan. *Acta Mater.* **56**, 580 (2008).
- [13] A.S. Schneider, D. Kaufmann, B.G. Clark, C.P. Frick, P.A. Gruber, R. Mönig, O. Kraft, E. Arzt. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 105 501 (2009).
- [14] J.-Y. Kim, D. Jang, J.R. Greer. *Acta Mater.* **58**, 2355 (2010).
- [15] A.S. Schneider, B.G. Clark, C.P. Frick, P.A. Gruber, E. Arzt. *Mater. Sci. Eng. A* **508**, 241 (2009).
- [16] J.-Y. Kim, J.R. Greer. *Appl. Phys. Lett.* **93**, 101 916 (2008).
- [17] J.R. Greer, C.R. Weinberger, W. Cai. *Mater. Sci. Eng. A* **493**, 21 (2008).
- [18] J.-Y. Kim, D. Jang, J.R. Greer. *Scripta Mater.* **61**, 300 (2009).
- [19] J.-Y. Kim, J.R. Greer. *Acta Mater.* **57**, 5245 (2009).
- [20] S.M. Han, T. Bozorg-Grayeli, J.R. Groves, W.D. Nix. *Scripta Mater.* **63**, 1153 (2010).
- [21] S. Brinckmann, J.Y. Kim, J.R. Greer. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 155 502 (2008).
- [22] A.T. Jennings, J. Li, J.R. Greer. *Acta Mater.* **59**, 5627 (2011).
- [23] J. Chen, L. Lu, K. Lu. *Scripta Mater.* **54**, 1913 (2006).
- [24] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 2161 (2007).
- [25] Q. Wei, S. Cheng, K.T. Ramesh, E. Ma. *Mater. Sci. Eng. A* **381**, 71 (2004).
- [26] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 961 (2007).
- [27] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **52**, 48 (2010).
- [28] H. Mecking, U.F. Kocks. *Acta Mater.* **32**, 57 (1984).
- [29] G.A. Malygin. *Phys. Status. Solidi A* **119**, 423 (1990).
- [30] Дж. Хирт, Н. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 599 с.
- [31] Г.А. Малыгин. *ФММ* **58**, 360 (1984).
- [32] R. Groger, V. Vitec. *Acta Mater.* **56**, 5426 (2008).