

PACS
ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА ДИНАМИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ
ТЕКУЧЕСТИ НАНОМАТЕРИАЛОВ

В. В. Малащенко

Донецкий физико-технический институт Академии наук Украины
83114 Донецк, Украина

Донецкий национальный технический университет
83000 Донецк, Украина

Выполнены аналитические оценки вклада динамического взаимодействия дислокаций с примесными атомами в величину деформирующих напряжений динамического предела текучести.

Введение

Интенсивная пластическая деформация значительно расширила возможности получения новых наноматериалов, под которыми подразумеваются объекты с характерным размером структурных элементов менее 100нм [1-2]. Важная роль в решении проблемы создания перспективных функциональных нанокристаллических материалов, сочетающих высокую прочность с высокой пластичностью, принадлежит методу гидроэкструзии [3, 4]. Довольно часто в нанокристаллах содержатся примеси, попавшие в них в процессе получения либо специально добавленные для повышения термостабильности исходного структурного состояния. Примесные добавки позволяют не только стабилизировать ультрамелкое зерно, но и сохранить высокий уровень предела текучести ультрамелкозернистых материалов [5, 6]. При дальнейшем использовании эти заготовки могут быть подвергнуты высокоскоростному нагружению, в частности, при высокоскоростной обработке, ковке, формовке. При этом для многих металлов зависимость напряжения течения от скорости деформирования резко усиливается, что связывается с изменением механизма движения

дислокаций, а именно с их переходом в динамический режим преодоления барьеров, создаваемых структурными несовершенствами кристалла [7]. Присутствие примеси в этом случае может оказать влияние на величину динамического предела текучести. Поведение нанокристаллических материалов при высокоскоростном деформировании исследовалось в целом ряде работ [7-10], однако влияние примесей на величину динамического предела текучести не изучалось.

Основные уравнения

Многочисленные исследования показали, что традиционный дислокационный подход к изучению закономерностей пластической деформации нанобъектов нуждается в серьезном пересмотре [11]. Количество дислокаций в нанопленках и наночастицах весьма ограничено, что обусловлено двумя основными причинами [12]: во-первых, размер петли Франка-Рида может превышать характерный размер нанобъекта, являющейся одним из главных источников дислокаций (размеры петли составляют обычно 20-2000 nm). Во-вторых, близость границ раздела приводит к выходу дислокаций из объема нанокристаллов под действием сил изображения. Авторами [13] было получено выражение для оценки минимального размера нанокристаллита, ниже которого вероятность наличия дислокаций весьма мала. Согласно их оценкам характерный размер устойчивости краевых дислокаций для меди, никеля, железа и нитрида титана составляет соответственно 25, 10, 2 и 1 nm, что не противоречит имеющимся экспериментальным данным. Так, авторам [14] удалось получить изображение нескольких краевых дислокаций в нанокристаллите размером около 10 nm, что согласуется с выводами авторов [13].

Многочисленные эксперименты, теоретические оценки и компьютерное моделирование позволили сделать вывод о том, что в

наноматериалах важным источником дислокаций является их испускание границами зерен в процессе пластической деформации [15].

Одним из аргументов в пользу недислокационного механизма деформации наноматериалов является отсутствие дислокаций при электронно-микроскопических исследованиях деформированных материалов *in situ* [16]. Однако, как было отмечено автором [17], трудности наблюдения дислокаций при пластической деформации связаны с тем, что дислокации, испущенные из границы зерна, после перемещения по нему исчезают в противоположной границе. При прохождении одной дислокации на поверхности образца образуется ступенька величиной порядка модуля вектора Бюргерса, так что наблюдать ее в экспериментах *in situ* не представляется возможным. Хотя в ультрамелкозернистых материалах содержится обычно не более одной дислокации, тем не менее дислокационная плотность в процессе пластической деформации может быть довольно высокой: $\rho \approx d^{-2}$, где d – размер зерна. Так, для $d = 1\mu\text{m}$ плотность дислокаций $\rho = 10^{12} \text{ m}^{-2}$, а если $d = 10\text{nm}$, получим значение $\rho = 10^{16} \text{ m}^{-2}$.

Возможность дислокационного скольжения в нанокристаллических материалах с размером зерна до 3.5 nm была продемонстрирована в ходе компьютерных экспериментов по пластическому деформированию нанокристаллического никеля и других металлов, проведенных путем моделирования их структуры на основе метода молекулярной динамики [18-20].

По мнению авторов [11], описание механического поведения нанокристаллов в рамках классических дислокационных моделей может быть наиболее успешным при анализе пластической деформации “крупных” нанокристаллов, размеры зерен которых приближаются к 100 nm. Это подтверждается результатами работы [17], автору которой на основании развитого им дислокационно-

кинетического подхода удалось описать зависимость предела текучести от степени деформации и размера зерна и получить численные оценки, согласующиеся с экспериментальными данными.

Как было отмечено в обзоре [17], при анализе процесса пластической деформации кристаллических, в том числе и поликристаллических материалов в рамках дислокационного подхода предполагается, что именно взаимодействие дислокаций друг с другом и с другими структурными несовершенствами определяет напряжение пластического течения τ . Величина этого напряжения, согласно [21], может быть получена с помощью соотношения Тейлора для деформационного упрочнения кристалла

$$\tau = \tau_f + \alpha \mu b \rho^{1/2} \quad (1)$$

где μ – модуль сдвига, α – постоянная взаимодействия дислокаций друг с другом, ρ – их средняя плотность, b – модуль вектора Бюргера дислокации, τ_f – напряжение трения при взаимодействии движущихся дислокаций с дефектами решетки, в том числе примесями, и препятствиями недеформационного происхождения. Как было отмечено в работах [21, 22], справедливость соотношения (1) для большого количества монокристаллов и поликристаллических материалов вплоть до плотностей дислокаций $10^{15} - 10^{16} \text{ m}^{-2}$. Подчеркнем, что в приведенном соотношении использована однородная средняя плотность дислокаций в кристалле. Если дислокации распределены неравномерно, как это имеет место при возникновении ячеистой или фрагментированной (блочной) дислокационных структур, формула (1) тоже справедлива при условии, что постоянная взаимодействия дислокаций α [23].

Как известно, работа дислокационных источников и размножение дислокаций приводят к увеличению плотности

дислокаций в кристалле. С другой стороны, при всех температурах деформации имеет место процесс аннигиляции дислокаций, ограничивающий скорость накопления дислокаций в материале. Как было отмечено в обзоре [17], поликристалличность материала усиливает процесс аккумуляции дислокаций, а в случае ультрамелкозернистых материалов способствует интенсификации процесса зернограничной аннигиляции, поскольку соотношение поверхности зерен и их объема значительно возрастает, а диффузионные расстояния в границах существенно снижаются.

Воспользовавшись соотношением, приведенным в работе [9], мы можем оценить вклад примесного торможения в величину динамического предела текучести по формуле

$$\sigma_d = \frac{\dot{\epsilon}}{\rho b^2} B_d \quad (2)$$

где $\dot{\epsilon}$ – скорость пластической деформации наноматериала, B_d – коэффициент динамического торможения дислокации примесями.

Рассмотрим движение краевой дислокации под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в поле точечных дефектов, хаотически распределенных в объеме зерна. Линия дислокации параллельна оси OZ , вектор Бюргерса параллелен оси OX , в положительном направлении которой дислокация скользит с постоянной скоростью v . Плоскость скольжения дислокации совпадает с плоскостью XOZ , а ее положение определяется функцией

$$X(y=0, z, t) = vt + w(y=0, z, t) \quad (3)$$

где функция $w(y=0, z, t)$ является случайной величиной, описывающей колебания элементов краевой дислокации в плоскости скольжения относительно невозмущенной дислокационной линии. Для описания исследуемого процесса воспользуемся подходом, развитым в работах [25-28]. Уравнение движения дислокации имеет вид

$$m \left\{ \frac{\partial X^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \right\} = b \left[\sigma_0 + \sigma_{xy}(vt + w; z) \right] - B \frac{\partial X}{\partial t} \quad (4)$$

Здесь m – масса единицы длины дислокации, B – константа демпфирования, обусловленная фононными, магннными, электронными либо иными механизмами диссипации, характеризующимися линейной зависимостью силы торможения дислокации от скорости ее скольжения, c – скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле, σ_{xy} – компонента тензора напряжений, создаваемых примесями на линии дислокации, $\sigma_{xy} = \sum_{i=1}^N \sigma_{xy,i}$, N – число примесей в кристалле. Будем рассматривать примеси как дефекты типа центра дилатации. Используем плавное обрезание поля напряжений примеси на расстояниях порядка ее радиуса

$$\sigma_{xy}(r) = \mu R^3 \chi \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \frac{1 - \exp(-r/R)}{r}. \quad (5)$$

где R – радиус примеси, χ – параметр несоответствия, μ – модуль сдвига.

Как следует из работ [25–28], существует область динамического скольжения одиночной дислокации, в которой спектр ее колебаний является нелинейным

$$\omega^2 = c^2 p_z^2 + \Delta_d^2, \quad (6)$$

где величина Δ_d является решением следующего уравнения

$$\Delta_d^2 = \frac{nb^2}{8\pi^3 m^2} \iiint d^3 p \frac{p_x^2 |\sigma_{xy}(p)|^2}{\Delta_d^2 + c^2 p_z^2 - p_x^2 v^2}, \quad (7)$$

где n – объемная концентрация примесей. Это область коллективного взаимодействия примесей с дислокацией. Такое взаимодействие может оказывать существенное влияние на движение дислокаций при больших концентрациях примеси, поскольку существенно изменяет

спектр колебаний дислокации, создавая в нем щель, которая может быть описана выражением

$$\Delta_d = \frac{c}{b} (n_0 \chi^2)^{1/3}, \quad (8)$$

здесь n_0 – безразмерная концентрация примесей, $n_0 = nR^3$.

Выполняя необходимые вычисления, окончательно для примесного вклада в динамический предел текучести наноматериала получим

$$\sigma_d = \frac{\pi n_0^{1/3} \mu^2 \chi^{2/3} b^2 \dot{\epsilon}}{3mc^3 R \rho} \approx \frac{\mu \dot{\epsilon} (n_0 \chi^2)^{1/3}}{\rho b c} \quad (9)$$

Выполним численные оценки для нанокристаллической меди, воспользовавшись данными работ [10, 17, 29, 30]. Так, для $\mu = 4,8 \cdot 10^{10}$ Па, $n_0 = 3 \cdot 10^{-3}$, $\rho = 10^{11} \text{ м}^{-2}$, $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$, $b = 2,55 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ примесный вклад в динамический предел текучести примерно равен 40 МПа, что составляет 10% предела текучести меди с размером зерна 100 нм и 5% для меди с размером зерна 25 нм.

Литература

1. Р.З. Валиев, И.В. Александров, Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства . Академкнига, Москва (2007).
2. Gleiter H., Acta Mater. **48**, 1, (2000).
3. V. Varyukhin, Y. Beygelzimer, R. Kulagin, O. Prokof'eva, A. Reshetov, Materials Science Forum, 667-669, (2011): 31-37.
4. Y. Beygelzimer, V. Varyukhin, S. Synkov, D. Orlov, Mater. Sci. Eng. A **503**, 14 (2009).
5. В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Б.И. Смирнов, А.Б. Лебедев, В.В. Ветров, С.А. Пульнев, В.И. Копылов, ФТТ, **40**, 1639 (1998).
6. А.В. Lebedev, S.A. Pulnev, V.I. Kopylov, Yu.A. Burenkov, V.V. Vetrov, O.V. Vylegzhanin, Scripta Mater., **35**, 1033 (1996).

7. В.С.Красников, А.Ю.Куксин, А.Е.Майер, А.В.Янилкин, ФТТ, **52**, 1295 (2010).
8. И.Н.Бородин, А.Е.Майер, ФТТ, **54**, 759 (2012).
9. А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин, ДАН, **413**, 615 (2007).
10. Г.И. Канель, В. Е. Фортов, С. В. Разоренов, УФН, **177**, 809 (2007).
11. Р.А. Андриевский, А.М. Глезер, УФН, **179**, 337 (2009).
12. Р.А. Андриевский, А.В. Рагуля. Наноструктурные материалы (М.: Академия, 2005).
13. V.G. Gryznov, I.A. Polonsky, A.E. Romanov, L.I. Trusov, Phys. Rev. **B 44**, 42 (1991).
14. Р.А. Андриевский, Г.В. Калинин, Д.В. Штанский, ФТТ, **42**, 741 (2000).
15. J. Schiøtz, F.D. Di Tolla, K.W. Jacobsen, Nature **391**, 561 (1998).
16. Н.И. Носкова, Е.Г. Волкова, ФММ, **91**, 100 (2001).
17. Г.А. Малыгин, ФТТ, **49**, 961 (2007).
18. J. Schiøtz, T. Vegge, F. D. Di Tolla, K. W. Jacobsen, Phys. Rev. B **60**, 11971 (1999).
19. H. Van Swygenhoven, M. Spaczer, A. Caro and D. Farkas, Phys. Rev. B, **60** 22 (1999).
20. H. Van Swygenhoven, D. Farkas, and A. Caro. Phys. Rev. B **62**, 831 (2000).
21. P. Ambrosi, W. Homeier, Ch. Schwink, Scripta Met. **14**, 183. (1980)
22. Г.А. Малыгин, ФТТ, **48**, 651 (2006).
23. Г.А. Малыгин, УФН, **169**, 979 (1999).
24. H. Conrad, Nanotechnology, **18**, 325701 (2007).
25. В.В. Малашенко, ФТТ, **53**, 2204 (2011).
26. В.В. Малашенко, ЖТФ, 2011, **9**, 67 (2011).
27. V.V. Malashenko, Physica B: Phys. Cond. Mat., **404**, 3890 (2009).

28. V.V. Malashenko, *Modern Phys. Lett. B.*, **23**, 2041 (2009).
29. P.G. Sanders, J.A. Eastman and J.R. Weertman, *Acta Mater.*, **45**, 4019 (1997).
30. S. Cheng, E. Ma, Y.M. Wang, L.J. Kecskes, K.M. Youssef, C.C. Koch, U.P. Trociewitz, K. Han. *Acta Mater.*, **53**, 1521 (2005).