Физика и техника высоких давлений 2012, том 22, № 3

PACS: 61.72.Ji, 61.72.Lk, 61.46.–w, 61.72.Mm, 62.25.–g

В.В. Малашенко

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА ДИНАМИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ ТЕКУЧЕСТИ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

Донецкий национальный технический университет
ул. Артема, 58, г. Донецк, 83001, Украина

Статья поступила в редакцию 14 ноября 2011 года

Рассмотрены условия применения дислокационных представлений для исследования неупругих свойств мелкозернистых материалов. Получено аналитическое выражение вклада динамического взаимодействия дислокаций с примесными атомами в величину динамического предела текучести. Выполнены численные оценки для нанокристаллической меди.

Ключевые слова: дислокация, предел текучести, примеси, наноматериалы

Введение

Интенсивная пластическая деформация значительно расширила возможности получения новых наноматериалов, под которыми подразумеваются объекты с характерным размером структурных элементов менее 100 nm [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. Целью настоящей работы является получение аналитического выражения примесного вклада в динамический предел текучести наноматериалов.

Основные уравнения

Многочисленные исследования показали, что традиционный дислокационный подход к изучению закономерностей пластической деформации нанообъектов нуждается в серьезном пересмотре [11]. Количество дислокаций в нанопленках и наночастицах весьма ограничено, что обусловлено двумя основными причинами [12]: во-первых, характерный размер нанообъекта может оказаться меньше размера петли Франка–Рида (обычно 20–2000 nm), являющейся одним из главных источников дислокаций; 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 зернах ультрамелкозернистых материалов 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 $d = 1$ μm плотность дислокаций $\rho = 10^{12}$ m^{-2}, а если $d = 10$ nm, получим значение $\rho = 10^{16}$ 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 иными структурными несовершенствами определяет напряжение пластического течения τ. Величина этого напряжения согласно [21] может быть получена с помощью соотношения Тейлора для деформационного упрочнения кристалла

$$\tau = \tau_f + \alpha\mu b\rho^{1/2}, \tag{1}$$

где μ – модуль сдвига, α – постоянная взаимодействия дислокаций друг с другом, ρ – их средняя плотность, b – модуль вектора Бюргерса 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) проверена для большого количества монокристаллов и поликристаллических материалов вплоть до плотностей дислокаций 10^{15}–10^{16} 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 заменяется ее эффективным значением [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

$$\sigma_d = \frac{\dot{\varepsilon}}{\rho b^2} B_d, \tag{2}$$

где $\dot{\varepsilon}$ – 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

$$X\left(y=0,z,t\right) = vt + w\left(y=0,z,t\right), \tag{3}$$

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

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

Здесь m – масса единицы длины дислокации; B – константа демпфирования, обусловленная фононными, магнонными, 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, $\sigma_{xy} = \sum_{i=1}^{N}\sigma_{xy,i}$, где N – число примесей в кристалле. Будем рассматривать примеси как дефекты типа центра дилатации. Используем плавное обрезание поля напряжений примеси на расстояниях порядка ее радиуса:

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

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

Как следует из работ [25–28], примеси в случае больших концентраций взаимодействуют с дислокацией коллективным образом, в результате чего спектр дислокационных колебаний становится нелинейным – в нем появляется щель Δ_d:

$$\omega^2 = c^2 p_z^2 + \Delta_d^2 . \tag{6}$$

Выражение для Δ_d является решением следующего уравнения:

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

где n – объемная концентрация примесей. Спектральная щель может быть описана приближенным выражением

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

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

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

$$\sigma_d = \frac{\pi n_0^{1/3} \mu^2 \chi^{2/3} b^2 \dot{\varepsilon}}{3mc^3 R\rho} \approx \frac{\mu\dot{\varepsilon}\left(n_0\chi^2\right)^{1/3}}{\rho bc}. \tag{9}$$

Выполним численные оценки для нанокристаллической меди, воспользовавшись данными работ [10,17,29,30]. Так, для $\mu = 4.8 \cdot 10^{10}$ Pa, $n_0 = 3 \cdot 10^{-3}$, $\rho = 10^{11}$ m^{-2}, $\dot{\varepsilon} = 2 \cdot 10^3$ s^{-1}, $b = 2.55 \cdot 10^{-10}$ m примесный вклад в динамический предел текучести примерно равен 40 MPa, что составляет 10% предела текучести меди с размером зерна 100 nm и 5% – для меди с размером зерна 25 nm.

Выводы

В представленной работе описано и проанализировано влияние примесей на механические свойства нанокристаллических материалов в результате их коллективного воздействия на динамическое движение дислокаций, в частности влияние на динамический предел текучести. Показано, что при высоких значениях концентрации примеси данный механизм может быть существенным и приводить к росту предела текучести на 10% и более.

1. *Р.З. Валиев, И.В. Александров*, Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства, Академкнига, Москва (2007).
2. *H. Gleiter*, Acta Mater. **48**, 1 (2000).
3. *V. Varyukhin, Y. Beygelzimer, R. Kulagin, O. Prokof'eva, A. Reshetov*, Mater. Sci. Forum **667–669**, 31 (2011).
4. *Y. Beygelzimer, V. Varyukhin, S. Synkov, D. Orlov*, Mater. Sci. Eng. **A503**, 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. *A.B. 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, Академия, Москва (2005).
13. *V.G. Gryznov, I.A. Polonsky, A.E. Romanov, L.I. Trusov*, Phys. Rev. **B44**, 42 (1991).
14. *Р.А. Андриевский, Г.В. Калинников, 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. **B60**, 11971 (1999).
19. *H. Van Swygenhoven, M. Spaczer, A. Caro, and D. Farkas*, Phys. Rev. **B60** 22 (1999).
20. *H. Van Swygenhoven, D. Farkas, and A. Caro*, Phys. Rev. **B62**, 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 **9**, 67 (2011).
27. *V.V. Malashenko*, Physica **B404**, 3890 (2009).
28. *V.V. Malashenko*, Modern Phys. Lett. **B23**, 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).

В.В. Малашенко

ВПЛИВ ДОМІШОК НА ДИНАМІЧНУ МЕЖУ ТЕКУЧОСТІ НАНОМАТЕРІАЛІВ

Проаналізовано можливість застосування дислокаційних уявлень для дослідження непружних властивостей дрібнозернистих матеріалів. Отримано аналітичний вираз вкладу динамічної взаємодії дислокацій з домішковими атомами в величину динамічної межі текучості. Виконано чисельні оцінки для нанокристалічної міді.

Ключові слова: дислокація, межа текучості, домішки, наноматеріали

V.V. Malashenko

IMPURITY EFFECT ON THE DYNAMIC YIELD POINT OF NANOMATERIALS

The possibility of application of dislocation concepts to study the inelastic properties of fine-grained materials is investigated. An analytical expression for the contribution of dynamic interaction of dislocations with impurity atoms to the value of dynamic yield stress is obtained. Numerical estimates for nanocrystalline copper are performed.

Keywords: dislocation, yield stress, impurities, nanomaterials