

# Механизм формирования микрополос сдвига при пластической деформации нанокристаллических материалов

© Г.А. Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
Санкт-Петербург, Россия

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

(Поступила в Редакцию 26 января 2009 г.)

В рамках дислокационно-кинетического подхода теоретически обсуждается механизм локализации деформации и формирования микрополос сдвига при пластической деформации субмикро- и нанокристаллических материалов. Сформулировано уравнение эволюции плотности и самоорганизации дислокаций в такого рода материалах с учетом того, что границы зерен являются основными источниками, стоками и барьерами для движущихся дислокаций. При решении уравнения найдено, что ширина микрополос и расстояние между ними зависят от размера нанозерен и степени пластической деформации. Показано также, что существует критический размер зерен (350 nm в случае  $\alpha$ -Fe), выше которого микрополосы в наноматериале не образуются. Теоретические результаты сопоставляются с имеющимися в литературе данными.

PACS: 62.25.+g, 62.20.Fe, 61.72.Cc

## 1. Введение

Пластическая деформация нанокристаллических (НК) ( $d < 100$  nm) и субмикрокристаллических (СМК) (размер зерен  $d < 1 \mu\text{m}$ ) металлов сопровождается неоднородным в микронном масштабе ее распределением по деформируемому материалу. Так, в [1,2] при деформировании НК-железа авторы наблюдали образование системы микрополос сдвига, ширина которых  $w$  увеличивалась с ростом среднего размера нанозерен  $d$  и на порядок его превосходила,  $w \approx 60d$ . Образование полос локализованного сдвига зафиксировано также в НК-палладии [3], никеле [4], меди [5] и субмикрокристаллическом алюминиевом сплаве [6]. В СМК-алюминии неоднородная деформация протекала в виде перемещения по образцу фронта Людерса [7] с образованием на диаграмме напряжение–деформация площадки текучести.

Из приведенных в [1,2] данных следует, что микрополосы являются местами сильной локализации деформации, деформация сдвига в которых достигает 200–300%. Полосы ориентированы в направлении действия максимальных касательных напряжений, приложенных к материалу. Электронно-микроскопическое исследование показало, что нанозерна внутри микрополос сильно вытянуты в направлении сдвига и содержат большую плотность дислокаций, в то время как вне полос нанозерна остаются равноосными и недеформированными. С ростом степени деформации увеличиваются как число полос, так и их ширина. В результате они образуют пространственно-регулярную структуру. В НК-Fe среднее расстояние между микрополосами  $\Lambda \approx (2-10)w$  составляет несколько десятков микрон. В [1,2] найдено также, что неоднородность деформации наблюдается, только если размер зерен становится меньше некоторого критического значения  $d_c$ , в случае НК-железа — меньше 300 nm. При больших размерах зерен деформация материала протекает однородно, т.е. равномерно охватывает все зерна, не локализуясь в виде микрополос.

Приведенные выше факты и наблюдения указывают на дислокационно-кооперативный механизм локализации пластической деформации в нанокристаллических металлах. Чем обусловлена эта кооперативность? Авторы [2] предполагают, что кооперативный характер сдвига обусловлен существованием в НК-металле зерен разного размера и, следовательно, согласно соотношению Холла–Петча, разного сопротивления деформированию. Пластическая деформация начинается в более мягких (крупных) нанозернах и по мере их деформационного упрочнения вовлекает в себя соседние, более мелкие зерна.

Дислокационно-кооперативный характер имеют многие явления, наблюдаемые при пластической деформации кристаллических тел, такие, например, как формирование ячеистой [8] и блочной (фрагментированной) [9] дислокационных структур, локализация деформации в виде полос устойчивого скольжения при механической усталости [10], образование „каналов скольжения“ в процессе пластической деформации радиационно-упрочненных или закаленных металлов [8]. С дислокационно-кинетической точки зрения [8], все эти структуры являются результатом процессов самоорганизации дислокаций, протекающих в тех или иных структурных условиях.

В настоящей работе с дислокационно-кинетических позиций рассмотрен механизм формирования микрополос сдвига в НК- и СМК-металлах. По сравнению с их крупнозернистыми аналогами специфика деформации металлов с размером зерен  $d < 1 \mu\text{m}$  состоит в том, что в них источниками, стоками и препятствиями для движения дислокаций являются в основном границы зерен [1–5,11,12]. В разделе 2 с учетом этого обстоятельства сформулировано уравнение для пространственно-временной эволюции средней плотности дислокаций в таких металлах. В разделах 3,4 проанализированы решения этого уравнения и сделано сравнение вытекающих

из него соотношений с имеющимися в литературе экспериментальными данными, касающимися микрополос сдвига в рассматриваемых материалах.

## 2. Уравнение эволюции плотности дислокаций в НК-металлах

Будем предполагать, как и в других перечисленных выше случаях, что при формировании микрополос сдвига доминирующим является процесс самоорганизации дислокаций. Уравнение эволюции средней плотности дислокаций  $\rho(x, y, t)$  в нанометалле запишем в виде редуцированного уравнения Свифта–Хоэнберга [13,14], содержащего в своей правой части характерные для нанозеренных структур дислокационные процессы,

$$\frac{\partial \rho(x, y, t)}{\partial t} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = (1 - \beta_{gb})nu + \frac{\beta}{d}u\rho - h_a u \rho^2, \quad (1a)$$

где

$$j_y = -(1 - \xi)\lambda_D u(\rho)\rho.$$

Здесь  $x$  — координата в направлении удлинения микрополос (в направлении действия касательных напряжений),  $y$  — координата в направлении их расширения,  $t$  — время,  $u$  — скорость дислокаций,  $j_y$  — диффузионный поток дислокаций,  $d$  — размер зерен,  $\lambda_D \approx d$  — расстояние диффузионного пробега дислокаций при расширении микрополосы,  $h_a$  — расстояние аннигиляции винтовых дислокаций в микрополосе механизмом поперечного скольжения [14]. В уравнении (1a) первый член в правой части описывает баланс объемных плотностей источников  $n$  и стоков  $\beta_{gb}n$  дислокаций в границах зерен, второе слагаемое отражает процесс аккумуляции дислокаций внутри нанозерен из-за ограничения длины их свободного пробега размером зерна ( $\beta \approx 1$ ), третье слагаемое учитывает аннигиляцию винтовых компонент дислокационных петель. Параметр  $\xi > 1$  обеспечивает пространственную неустойчивость распределения плотности дислокаций (неустойчивость Тьюринга [13,14]), а параметр  $\beta_{gb}$  равен относительной эффективности границ зерен как источников и стоков для дислокаций.

При дифференцировании потока  $j_y$  в левой стороне уравнения (1) необходимо принять во внимание зависимость скорости дислокаций от их плотности из-за деформационного (дислокационного) упрочнения наноматериала. С учетом того, что

$$\frac{\partial u(\rho)}{\partial y} = \left( \frac{u}{\rho} \left( \frac{\partial \ln u}{\partial \ln \rho} \right) \right) \frac{\partial \rho}{\partial y}, \quad \frac{\partial \ln u}{\partial \ln \rho} = \left( \frac{\partial \ln u}{\partial \ln \tau} \right) \frac{\partial \ln \tau}{\partial \ln \rho},$$

левая сторона уравнения (1a) принимает вид [14]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(x, y, t)}{\partial t} + (\xi - 1)\lambda_D u \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \frac{M}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^2 \right) \\ = (1 - \beta_{gb})nu + \frac{\beta}{d}u\rho - h_a u \rho^2, \end{aligned} \quad (1b)$$

где  $M = m^{-1}$ ,  $m = d \ln \tau / d \ln u = k_B T / V \tau$  — коэффициент скоростной чувствительности (СЧ) сдвиговых

напряжений течения  $\tau$ ,  $V$  — активационный объем,  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана. В нанокристаллических металлах с ГЦК- [15] и ОЦК- [16] решетками коэффициент  $m$  зависит от размера нанозерен (см. также [12]).

Для дальнейшего анализа и решения уравнения (1b) его удобно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \rho(x, y, \gamma)}{\partial \gamma} + (\xi - 1) \frac{\lambda_D}{b} \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \frac{M}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^2 \right) \\ = (1 - \beta_{gb}) \frac{n}{b} + \frac{\beta}{bd} \rho - k_a \rho^2, \end{aligned} \quad (2)$$

воспользовавшись тем, что в условиях опыта с постоянной скоростью деформации имеет место соотношение  $\partial \rho / \partial t = (\partial \rho / \partial \gamma) \dot{\gamma}$ , где  $\gamma$  и  $\dot{\gamma} = b \rho u$  — соответственно деформация сдвига и ее скорость,  $b$  — вектор Бюргера. Поскольку скорость удлинения микрополос существенно выше, чем скорость их расширения [1,2], вместо двумерной задачи рассмотрим ее одномерный вариант. Решение нелинейного уравнения (2) будем искать в виде  $\rho(y, \gamma) = \rho_0 v(\gamma) \psi(y)$ , где  $\rho_0 = 1/bd$ . Подставляя плотность  $\rho(y, \gamma)$  в (2) и разделяя переменные, получаем уравнения для неизвестных функций  $v$  и  $\psi$

$$\rho_0 \frac{\partial v}{\partial \gamma} + k_a \rho_0 v = \lambda, \quad (3a)$$

$$\begin{aligned} (\xi - 1) \frac{\lambda_D}{b} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{M}{\psi} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 \right) \\ = (1 - \beta_{gb}) \frac{n}{b \rho_0 v(\gamma)} + \frac{\beta}{bd} \psi - \lambda \psi^2, \end{aligned} \quad (3b)$$

где  $\lambda$  — константа разделения.

Функция  $v(\gamma)$  в уравнениях (3) описывает зависимость плотности дислокаций, а следовательно, и напряжений течения наноматериала от степени пластической деформации. В [11] найдено, что в случае НК-металлов с экспериментом хорошо согласуется зависимость вида

$$v(\gamma) = \beta_0 \exp(-k_a \gamma) + \frac{\beta}{k_a} (1 - \exp(-k_a \gamma)), \quad (4a)$$

где  $\beta_0 \approx 10^{-2} - 10^0$  — параметр, зависящий от плотности ступенек на границах зерен и определяющий начальную плотность дислокаций, а также величину коэффициента Холла–Петча [11]. Функция (4a) удовлетворяет уравнению (3a) при условии  $\lambda = \beta \rho_0$ . В результате уравнение (3b) преобразуется к виду

$$\Lambda_0^2 \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{M}{\psi} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 \right) = (1 - \beta_{gb}) \frac{nb d^2 k_a}{\beta^2 v_0(\gamma)} + \psi - \psi^2, \quad (4b)$$

$$\begin{aligned} v_0(\gamma) &= \beta^{-1} k_a v(\gamma) \\ &= (\beta_0 / \beta) k_a \exp(-k_a \gamma) + (1 - \exp(-k_a \gamma)), \end{aligned} \quad (4c)$$

где  $\Lambda_0(d) = [(\xi - 1)\lambda_D d / \beta]^{1/2} \sim d$ .

Из правой части уравнения (4b) видно, что полного разделения переменных  $\gamma$  и  $y$  не происходит. Разделение имеет место в предельном случае  $\gamma \rightarrow \infty$ , когда  $v_0(\infty) = 1$ . На рис. 1 кривые демонстрируют зависимость  $v_0(\gamma)$  при  $k_a = 10$  и разных значениях комбинации параметров  $(\beta_0/\beta)k_a$  в (4c). При величине этой комбинации, превышающей единицу (кривая 4), плотность дислокаций, а следовательно, и напряжение течения снижаются с ростом степени пластической деформации. Именно такая ситуация имеет место при деформировании НК-железа [1,2] (см. далее). При  $(\beta_0/\beta)k_a \geq 1$  функция  $v_0(\gamma)$  не сильно отличается от единицы, поэтому уравнения (4a) и (4b) можно считать условно разделенными.

Для объемной плотности дислокационных источников имеем соотношение  $n = (sl_b d)^{-1}$ , где  $s \approx 2b$  — ширина границ зерен,  $l_b^{-1}$  — линейная плотность источников дислокаций в границах, зависящая от плотности ступенек на них [11]. Подставляя плотность  $n$  в уравнение (4b), имеем окончательную форму этого уравнения

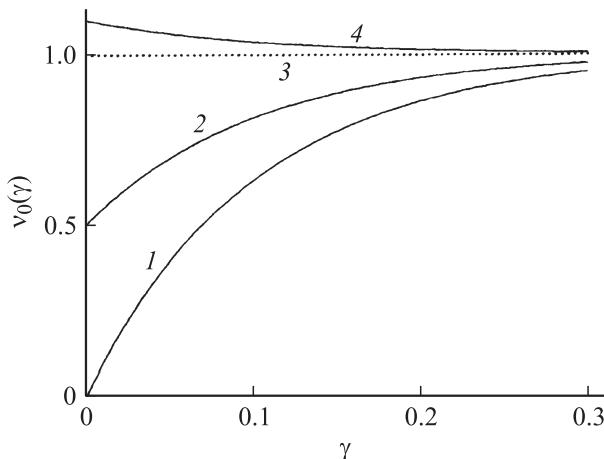
$$\frac{d^2\psi}{dY^2} + \frac{M}{\psi} \left(\frac{d\psi}{dY}\right)^2 = (1 - \beta_{gb}) \frac{d}{v_0(\gamma)d_0} + \psi - \psi^2, \quad (5)$$

где  $Y = y/\Lambda_0$ ,  $d_0 = \beta^2 s l_b / b k_a$ . Далее, вводя обозначение  $(d\psi/dY)^2 = W(\psi)$  и используя соотношение  $d^2\psi/dY^2 = dW/d\psi$  и граничное условие  $d\psi/dY|_{\psi=0} = 0$ , получаем после однократного интегрирования (5) уравнения

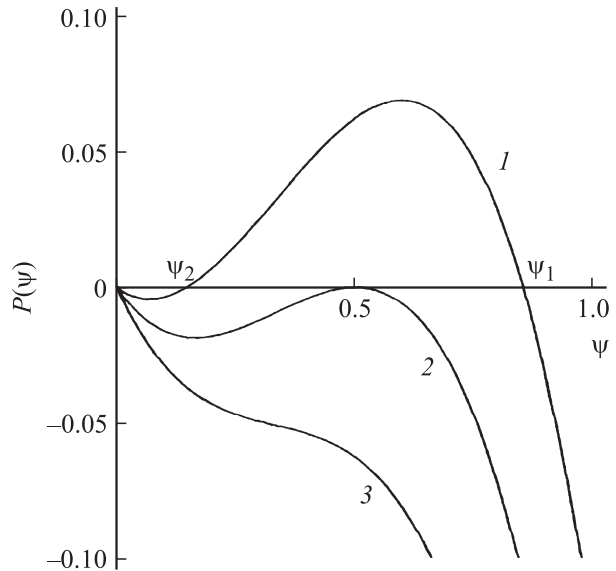
$$(M + 3) \left(\frac{d\psi}{dY}\right)^2 = P(\psi) = \psi(\psi_1 - \psi)(\psi - \psi_2), \quad (6a)$$

$$\psi_{1,2} = \frac{1}{2} A(M) \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{B(M)d}{v_0(\gamma)d_c}}\right), \quad d_c = \frac{3d_0}{16(\beta_{gb} - 1)k_a}, \quad (6b)$$

в которых  $A(M) = (M + 3)/(M + 2)$ ,  $B(M) = (M + 3)/(M + 1)A(M)$ . Поскольку коэффициент СЧ



**Рис. 1.** Зависимости безразмерной плотности дислокаций  $v_0$  от степени пластической деформации согласно уравнению (4c) при значениях комбинации параметров  $\beta_0 k_a / \beta = 0$  (1), 0.5 (2), 1.0 (3) и 1.1 (4).



**Рис. 2.** Зависимость кинетического потенциала  $P$  от безразмерной плотности дислокаций  $\psi$  при  $v_0(\infty) = 1$  и размерах зерен  $d = 0.5d_c$  (1),  $d_c$  (2) и  $1.5d_c$  (3).

напряжений течения в нанометаллах  $m \ll 1$  [12,15,16], в (6)  $M = m^{-1} \gg 1$ ,  $A(M) \approx B(M) \approx 1$ .

Рис. 2 демонстрирует зависимость кинетического потенциала  $P(\psi)$  (6a) от безразмерной плотности дислокаций  $\psi$  при  $\beta_{gb} > 1$ ,  $v_0(\infty) = 1$ ,  $A = B = 1$  и размерах зерен соответственно  $d = 0.6d_c$  (кривая 1),  $d = d_c$  (кривая 2) и  $d = 1.5d_c$  (кривая 3). Видно, что при величине зерен меньше критического значения  $d_c$  квадрат производной  $d\psi/dY$  положителен при условии  $\psi_2 < \psi < \psi_1$ , отрицателен при  $d \geq d_c$  и равен нулю при  $d = d_c$  и  $\psi = \psi_1 = \psi_2 = 1/2$ . При размерах зерен  $d < v_0(\gamma)d_c$ , когда потенциал  $P(\psi)$  положителен и становится возможной самоорганизация дислокаций, решением уравнения (6a) является эллиптический интеграл первого рода

$$\frac{y}{(M + 3)^{1/2} \Lambda_0} = \int_{\psi_2}^{\psi(\theta)} \frac{d\psi}{[P(\psi)]^{1/2}} = \frac{2}{\psi_1^{1/2}} F(\theta, k), \quad (7a)$$

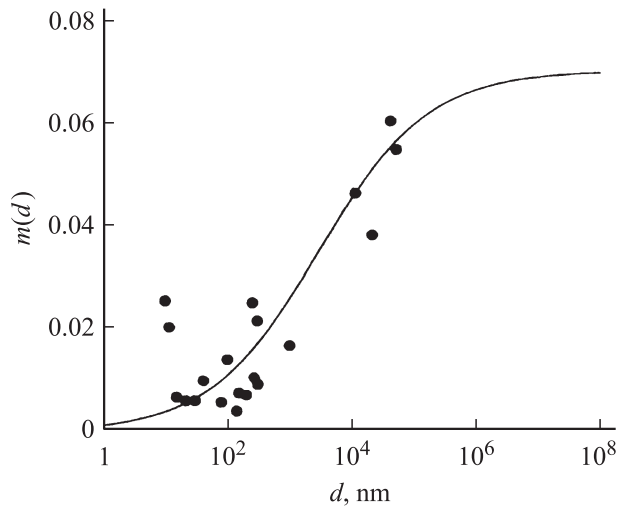
$$\psi(\theta) = \frac{\psi_2}{1 - k^2 \sin^2(\theta)}, \quad k = \left(\frac{\psi_1 - \psi_2}{\psi_1}\right)^{1/2}. \quad (7b)$$

Он описывает пространственно неоднородную в направлении оси  $y$  дислокационную структуру с периодом  $\Lambda$

$$\frac{y}{\Lambda} = \frac{1}{2} \frac{F(\theta, k)}{F(\pi/2, k)}, \quad \Lambda = \frac{4\sqrt{M+3}\Lambda_0}{\psi_1^{1/2}} F\left(\frac{\pi}{2}, k\right). \quad (8)$$

Параметры структуры зависят от размера нанозерен  $d$  и деформации  $\gamma$ , поскольку от них зависят корни  $\psi_1$  и  $\psi_2$  (6b), модуль  $k$  интеграла (7), а также параметры  $\Lambda_0$  и  $M(d) = m(d)^{-1}$  в соотношениях (8). В нанокристаллическом ОЦК-металле зависимость коэффициента  $m$  от  $d$  имеет вид [12]

$$m = m_p \left(1 + \left(\frac{d_p}{d}\right)^{1/2}\right)^{-1}. \quad (9)$$



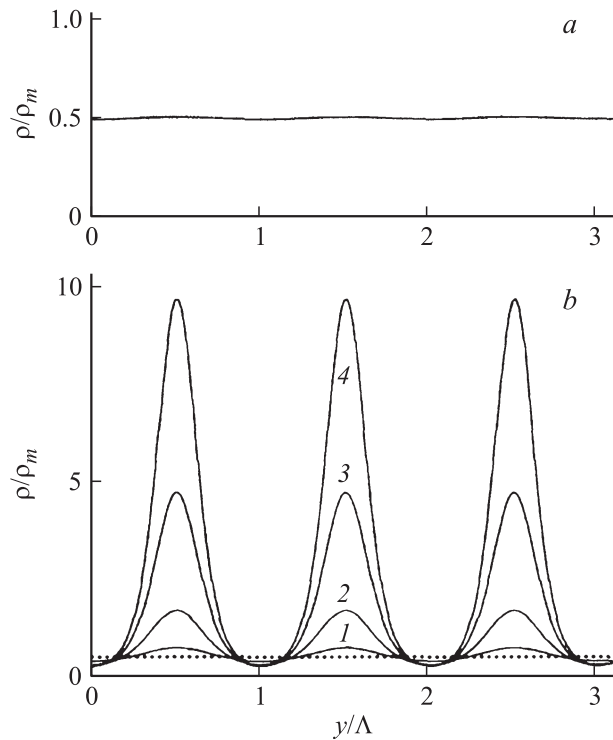
**Рис. 3.** Зависимость коэффициента скоростной чувствительности напряжения течения в НК-Fe от размера зерен [16]. Кривая — расчет согласно соотношению (9), точки — эксперимент.

На рис. 3 приведены экспериментальные данные, касающиеся этой зависимости в НК-железе [16]. Кривая на этом рисунке проведена согласно соотношению (9) при  $m_p = 0.07$  и  $d_p = 2.9 \cdot 10^3$  nm, где  $m_p$  — величина коэффициента СЧ в крупнозернистом армко-Fe,  $d_p$  — характерный размер критических двойных перегибов в рельефе Пайерлса, когда их ширина становится сравнимой с размером зерен.

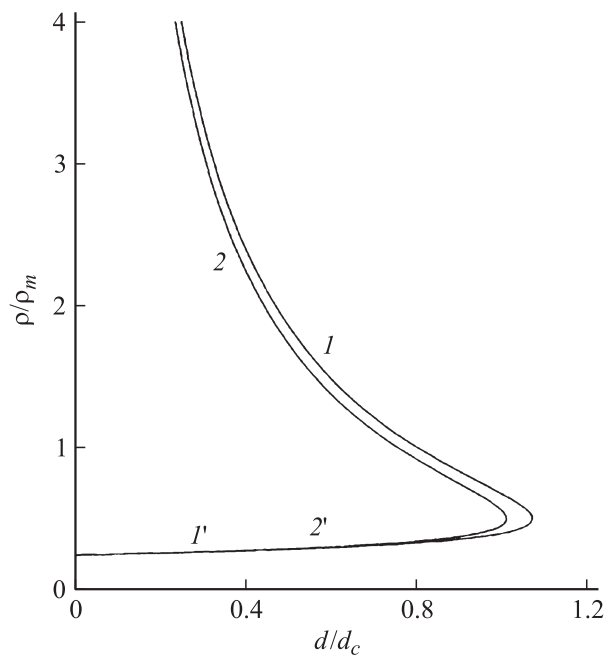
### 3. Структура и параметры микрополос

Рис. 4, *a* и *b* демонстрируют в приведенных координатах  $\rho/\rho_m - y/\Lambda$ , где  $\rho_m = \beta/bd_c k_a$ , как изменяется плотность дислокаций  $\rho(y, \gamma, d) = \rho_m(d_c/d)v_0(\gamma)\psi(y, \gamma, d)$  в НК-материале согласно соотношениям (7) и (8) при  $v_0(\gamma) = 1$  ( $\gamma \rightarrow \infty$ ) и вариации величины зерен  $d$ . Видно, что при  $d \geq d_c$  (рис. 4, *a*) дислокации равномерно распределены по наноматериалу, а при  $d < d_c$  они образуют микрополосы, в которых плотность дислокаций увеличивается по мере уменьшения размера зерен (рис. 4, *b*) и слегка снижается с ростом степени деформации  $\gamma$  (рис. 5). Пунктир на рис. 4, *b* показывает величину плотности дислокаций, соответствующую однородной плотности на рис. 4, *a*. Она существенно меньше, чем плотность дислокаций в микрополосах.

Из приведенных на рис. 4 и 5 результатов видно также, что плотность дислокаций между полосами скольжения (отрезки 1' и 2' кривых на рис. 5) мала и практически не зависит ни от размера зерен, ни от степени пластической деформации. В то же время в микрополосах она непрерывно возрастает как  $d^{-1}$  (сегменты 1 и 2 кривых на рис. 5) вследствие работы дислокационных источников в границах зерен и аккумуляции дислокаций внутри зерен. При расчете кривых на рис. 5



**Рис. 4.** Распределение плотности дислокаций в НК-металле согласно соотношениям (7) и (8) при различных размерах зерен. *a* —  $d \geq d_c$ ; *b* —  $d = 0.9d_c$  (1),  $0.5d_c$  (2),  $0.2d_c$  (3) и  $0.1d_c$  (4).



**Рис. 5.** Зависимость максимальной плотности дислокаций в микрополосе (отрезки 1 и 2) и минимальной их плотности между полосами (отрезки 1' и 2') от величины нанозерен при различных степенях пластической деформации.  $\gamma = 0.05$  (1, 1') и  $\infty$  (2, 2').

использовались те же значения коэффициента аннигиляции дислокаций  $k_a$  и комбинации параметров  $(\beta_0/\beta)k_a$  в формуле (4с), что и при расчете кривой 4 на рис. 1.

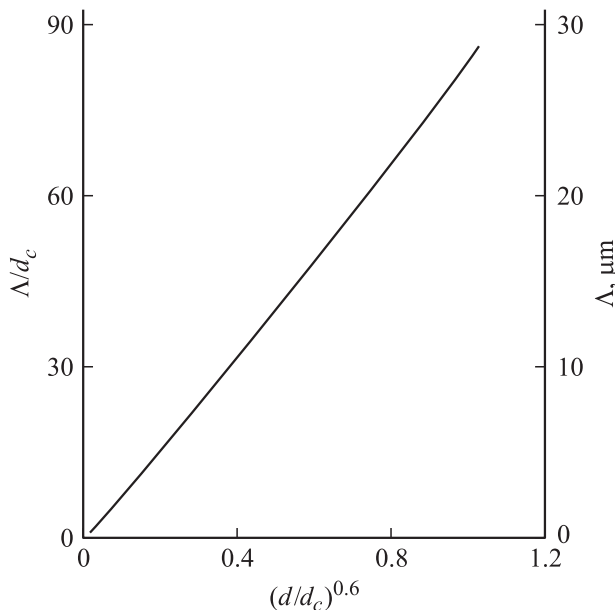
Особый интерес представляют зависимости ширины микрополос  $w$  и расстояний между ними  $\Lambda$  от размера зерен и степени пластической деформации. На рис. 6 в координатах  $\Lambda/d_c - (d/d_c)^{0.6}$  показано, как изменяется расстояние между микрополосами согласно соотношению (8) при вариации размеров зерен. При расчете кривых  $\Lambda(d)$  использовались зависимости параметров  $M(d) \sim d^{-1/2}$  и  $\Lambda_0(d) \sim d$  от размера зерен согласно формулам (4b) и (8) при  $\xi = 2.5$ ,  $\beta = 1$ ,  $\lambda_D = d$  и приведенных выше значениях параметров  $m_P$  и  $d_P$  для армо-железа. Из рис. 6 видно, что при измельчении зерен расстояние между микрополосами изменяется в соответствии с законом  $\Lambda \sim d^{0.6}$ . Деления правой оси на рис. 6 соответствуют критическому размеру зерен  $d_c = 0.35 \mu\text{m}$ .

Согласно (7) и (8), для определения ширины микрополос  $w$  на уровне приведенной плотности дислокаций  $\rho/\rho_m = f$  имеем соотношения

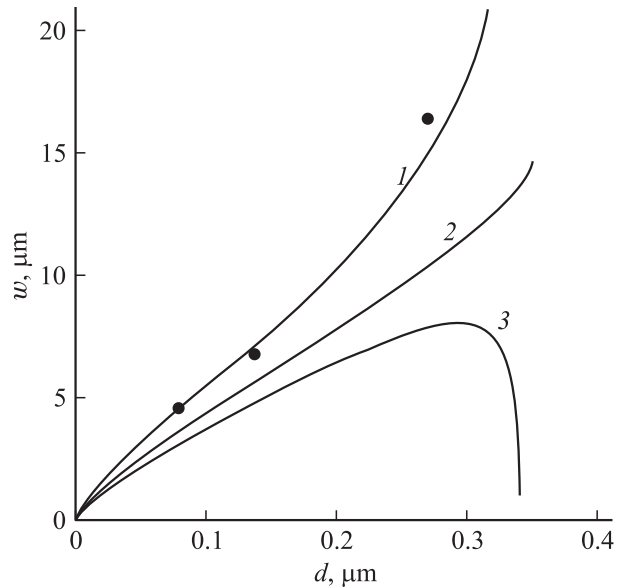
$$w = 2y_0 = \Lambda \frac{F(\pi/2 - \theta_0, k)}{F(\pi/2, k)},$$

$$\theta_0 = \arcsin \left[ \frac{(1 - \psi_2 d_c v(\gamma)/fd)^{1/2}}{k(d, \gamma)} \right], \quad (10)$$

где  $y_0$  — полуширина полосы при заданной величине параметра  $f$ ,  $\theta_0$  — соответствующий ему угол эллиптического интеграла (7). На рис. 7 приведены данные [2] по зависимости ширины микрополос от размера зерен в НК-Fe. Кривые на рисунке рассчитаны в соответствии с соотношениями (10) при значениях параметров  $d_c = 0.35 \mu\text{m}$ ,  $v_0(\infty) = 1$  и нескольких значениях



**Рис. 6.** Зависимость расстояния между микрополосами  $\Lambda$  от размера зерен согласно соотношению (8). Правая ось соответствует критическому размеру зерен  $d_c = 0.35 \mu\text{m}$ .



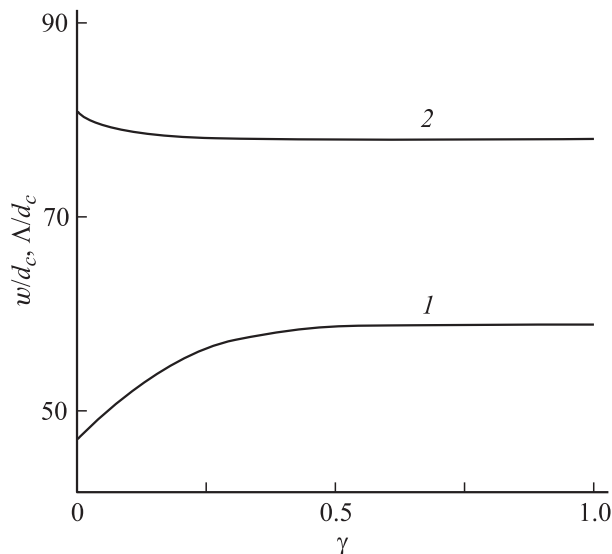
**Рис. 7.** Зависимость ширины микрополос  $w$  от размера зерен согласно соотношению (10) при  $v(\infty) = 1$  и значениях параметра  $f = 0.4$  (1),  $0.5$  (2) и  $0.6$  (3). Экспериментальные точки — данные [2] для НК-Fe.

параметра  $f$ , определяющего относительную величину плотности дислокации, при которой измеряется ширина микрополос. Видно, что при указанных выше значениях параметров эксперименту лучше соответствует значение  $f = 0.4$ . Как показывает расчет (рис. 8), при этих значениях параметров ширина микрополос  $w$  с ростом степени деформации увеличивается (кривая 1), а расстояние между ними  $\Lambda$  уменьшается (кривая 2).

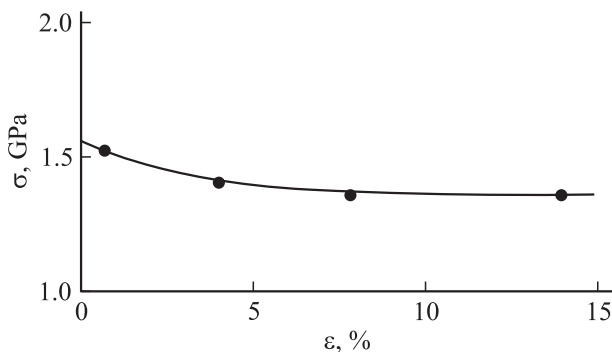
#### 4. Обсуждение результатов

В настоящее время отсутствуют полномасштабные и систематические исследования механизма формирования и параметров микрополос в наноматериалах в зависимости от размера нанозерен и степени пластической деформации. Имеются лишь качественные наблюдения [3–6] и отдельные количественные данные [1,2] (рис. 7). Приведенные выше результаты теоретического расчета характеристик и структуры микрополос, основанные на дислокационно-кинетической модели их формирования (раздел 2), находятся в удовлетворительном соответствии с имеющимися на данный момент эмпирическими наблюдениями, касающимися неоднородного распределения пластической деформации в НК-металлах в виде микрополос сдвига шириной, значительно превышающей размеры нанозерен.

Так, в согласии с данными [1,2] для НК-железа расчет показывает, что существует критический размер зерен  $d_c$  (рис. 2 и 4), выше которого микрополосы в нанокристаллическом материале не формируются. Что касается структуры микрополос и зависимости их параметров от размера зерен (рис. 6 и 7) и степени пластической



**Рис. 8.** Зависимость ширины полос  $w$  (1) и расстояния между ними  $\Lambda$  (2) от степени пластической деформации согласно соотношениям (8) и (10) при  $d = 0.9d_c$  и  $\beta_0 k_a / \beta = 1.2$ .



**Рис. 9.** Зависимость напряжения течения  $\sigma$  от деформации сжатия  $\varepsilon$  в НК-Fe (размер зерна  $0.268 \mu\text{m}$ ) согласно уравнению (11). Экспериментальные точки — данные [2].

деформации (рис. 8), то здесь также имеется хорошее качественное соответствие результатам работ [1,2]. Авторы [1,2] отмечают, что микрополосы заметной ширины образуются сразу с началом пластической деформации, что согласуется с результатами расчета эволюции ширины микрополос с деформацией, приведенными на рис. 8 (кривая 1).

Другой характерной особенностью микролокализации пластической деформации в НК-металлах является большая величина деформации пластического сдвига в микрополосах,  $\gamma_p \approx 2-3$  [1]. При дислокационной деформации величина сдвига определяется соотношением Орована  $\gamma_p = b\rho L$ , где  $L$  — длина свободного пробега дислокаций. Из приведенных на рис. 5 результатов следует, что при  $d < d_c$  максимальная плотность дислокаций в микрополосе (кривая 2) подчиняется соотношению  $\rho_{\text{max}}/\rho_m = d_c/d$ . Следовательно, для плотности дислокаций в полосе и деформации сдвига получаем оцен-

ки  $\rho_{\text{max}} = \beta/bdk_a = 4 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$  ( $\beta = 1$ ,  $b = 0.25 \text{ nm}$ ,  $d = 100 \text{ nm}$ ,  $k_a = 10$ ) и  $\gamma_p = \beta L/dk_a = 0.1(L/d)$ . Из второй оценки следует, что при  $L = d$  деформация сдвига в микрополосе  $\gamma_p$  равна 10%, а при  $L = w/2 \approx 30d$  (рис. 7) она приближается к величине деформации сдвига 300%, наблюдаемой на опыте [1].

Есть еще одна возможность количественной проверки рассмотренной выше дислокационно-кинетической модели эволюции плотности дислокаций в НК-материале — это анализ кривой его деформации  $\sigma-\varepsilon$ . На рис. 9 экспериментальные точки иллюстрируют величину напряжения течения  $\sigma$  НК-железа (размер зерна  $0.268 \mu\text{m}$ ), деформировавшегося с образованием микрополос сдвига, при нескольких значениях деформации сжатия  $\varepsilon$ . Как и в [11], будем предполагать, что сдвиговые напряжения течения НК-материала подчиняются соотношению Тейлора  $\tau = \alpha\mu b\rho^{1/2}$ , где  $\alpha$  — постоянная взаимодействия дислокаций,  $\mu$  — модуль сдвига. Плотность дислокаций в наноматериале в обозначениях настоящей работы описывается соотношением  $\rho(\gamma) = \rho_0 v(\gamma)$ , где  $\rho_0 = 1/bd$ , а  $v(\gamma)$  имеет вид формулы (4а). В результате для зависимости напряжения течения  $\sigma = m_T \tau$  от деформации сжатия  $\varepsilon = \gamma/m_T$  получаем соотношение

$$\sigma(\varepsilon) = m_T \alpha \mu \left(\frac{b}{d}\right)^{1/2} \left[ \beta_0 \exp(-m_T k_a \varepsilon) + \frac{\beta}{k_a} (1 - \exp(-m_T k_a \varepsilon)) \right]^{1/2}, \quad (11)$$

где  $m_T = 3.05$  — фактор Тейлора для поликристалла.

Согласно (11), при  $\varepsilon = 0$  напряжение течения зависит от параметра  $\beta_0$ ,  $\sigma(0) = m_T \alpha \mu (\beta_0 b/d)^{1/2}$ , а при  $\varepsilon = \infty$  — от параметра  $\beta$  и коэффициента аннигиляции дислокаций,  $\sigma(\infty) = m_T \alpha \mu (\beta b/dk_a)^{1/2}$ . Экспериментальные значения этих напряжений в НК-железе соответственно равны 1.55 и 1.35 ГПа (рис. 9). Из теоретического  $\sigma(0)/\sigma(\infty) = (\beta_0 k_a / \beta)^{1/2}$  и экспериментального  $\sigma(0)/\sigma(\infty) = 1.12$  отношений этих напряжений получаем при  $\beta = 1$  и  $k_a = 10.5$  [17] оценку параметра  $\beta_0 = 0.12$ . Далее, подставляя это значение  $\beta_0$ , а также  $b = 0.25 \text{ nm}$ ,  $d = 286 \text{ nm}$  и  $\mu = 83 \text{ GPa}$  в соотношение для напряжения  $\sigma(0)$ , имеем разумную оценку постоянной взаимодействия дислокаций  $\alpha = 0.57$ . На рис. 9 кривая демонстрирует зависимость напряжения течения от деформации согласно уравнению (11) при найденных выше значениях параметров.

В заключение раздела заметим, что, согласно уравнению (11), коэффициент Холла–Петча  $K_y = d\sigma/d(d^{-1/2})$  при  $\varepsilon = 0.2\%$  определяется в основном величиной параметра  $\beta_0$ ,  $K_y = m_T \alpha \mu (\beta \beta_0)^{1/2}$ , и равен  $24.9 \text{ GPa} \cdot \text{nm}^{1/2}$ , что хорошо соответствует величине этого коэффициента в нанокристаллическом  $\alpha$ -Fe, полученной при обработке данных [2].

Таким образом, проведенный в работе детальный анализ механизма формирования специфических микрополос сдвига в нанокристаллических металлах на основе дислокационно-кинетического подхода демонстрирует

широкие возможности этого подхода для исследования деформационных и прочностных свойств кристаллических тел в их различных структурных состояниях. В рассматриваемом в работе случае он позволил установить зависимость параметров микрополос от размера нанозерен и существование их критического размера, при превышении которого формирование микрополос в наноматериале не происходит вследствие отсутствия в нем условий для самоорганизации дислокаций.

## Список литературы

- [1] Q. Wei, D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma. *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1240 (2002).
- [2] D. Jia, K.T. Ramesh, E. Ma. *Acta Mater.* **51**, 3495 (2003).
- [3] P.G. Sanders, C.J. Yougdah, J.R. Weertman. *Mater. Sci. Eng. A* **234/236**, 77 (1997).
- [4] F. Dalla Torre, H.V. Swygenhoven, M. Victoria. *Acta Mater.* **50**, 3957 (2002).
- [5] 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).
- [6] I. Sabirov, Y. Estrin, M.R. Barnett, I. Timochina, P.D. Hodgson. *Scripta Mater.* **58**, 163 (2008).
- [7] C.Y. Yu, P.W. Kao, C.P. Chang. *Acta Mater.* **53**, 4019 (2005).
- [8] Г.А. Малыгин. *УФН* **169**, 979 (1999).
- [9] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **48**, 651 (2006).
- [10] A.T. Winter. *Phil. Mag.* **31**, 411 (1975).
- [11] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 961 (2007).
- [12] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 2161 (2007).
- [13] M.C. Cross, P.C. Hohenberg. *Rev. Mod. Phys.* **65**, 2492 (1993).
- [14] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **37**, 3 (1995).
- [15] J. Chen, L. Lu, K. Lu. *Scripta Mater.* **54**, 1913 (2006).
- [16] Q. Wei, S. Cheng, K.T. Ramesh, E. Ma. *Mater. Sci. Eng. A* **381**, 71 (2004).
- [17] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **47**, 870 (2005).