

Влияние зернограничного скольжения на трещиностойкость нанокристаллических керамик

© И.А. Овидько, Н.В. Скиба, А.Г. Шейнерман

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ovidko@def.ipme.ru, skiba_n@mail.ru

(Поступила в Редакцию 26 ноября 2007 г.)

Предложена теоретическая модель, описывающая новый физический микромеханизм повышения трещиностойкости нанокристаллических керамик. Согласно представлениям предлагаемой модели, при деформировании нанокерамики с микротрещиной вблизи ее вершины при определенных условиях реализуется интенсивное межзеренное скольжение. Такое сколождение сопровождается образованием ансамбля диполей дисклинаций (ротационных дефектов), создающих поля упругих напряжений. Последние частично компенсируют высокие локальные напряжения, концентрируемые микротрещиной вблизи ее вершины, и таким образом препятствуют росту микротрещины. В рамках предлагаемой модели получены теоретические оценки увеличения критических длин микротрещин (длин, при превышении которых происходит катастрофический рост микротрещин) вследствие образования диполей дисклинаций при межзеренном скольжении в нанокерамиках. Такое увеличение критических длин количественно характеризует соответствующие повышения трещиностойкости нанокерамик.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (контракт № 02.513.11.3190 Программы „Индустрия наносистем и материалов“ и грант Президента РФ МК-5122.2007.1), Программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций“, Фонда CRDF (грант № RUE2-2684-ST-05), Санкт-Петербургского научного центра РАН и Фонда содействия отечественной науке.

PACS: 61.72.Bb, 61.72.Lk, 62.20.Mk

1. Введение

Нанокристаллические твердые тела, имеющие необычные физические и механические свойства являются предметом интенсивных научных исследований (см., например, [1–10]). В частности, нанокристаллические керамики (нанокерамики) обычно имеют очень высокие показатели прочности и твердости, в то время как их пластичность и трещиностойкость при комнатной температуре малы [1,9,10]. Механические свойства нанокерамик обусловлены двумя основными эффектами. Во-первых, наноскопические размеры зерен и высокие значения барьера Пайерлса в нанокерамиках существенно ограничивают действие решеточного дислокационного скольжения. Во-вторых, значительную долю объема нанокерамик занимают межзеренные границы и их тройные стыки. Поэтому в нанокерамиках эффективно действуют межзеренное скольжение [4,5] и, возможно, другие механизмы пластической деформации, реализуемые в межзеренных границах. Эти механизмы пластической деформации способны не только служить каналами релаксации напряжений в местах их концентрации, препятствуя зарождению нанотрещин, но и замедлять или останавливать рост уже образовавшихся (суб)микротрещин. Тем самым такие нетипичные для большинства крупнозернистых поликристаллов механизмы повышения трещиностойкости, в то время как традиционный механизм торможения трещин — испускание дислокаций из вершин трещин — не является эффек-

тивным в нанокерамиках. Цель настоящей работы — разработка теоретической модели, которая описывает тормозящее влияние межзеренного скольжения на рост трещин в нанокерамиках.

2. Формирование диполей дисклинаций вблизи вершины микротрещины. Модель

Рассмотрим двумерную модель нанокристаллической керамики, находящейся под действием внешней одноосной растягивающей нагрузки σ_0 (рис. 1). В рамках модели нанокерамика представляет собой упругоизотропное бесконечное тело с модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν . В нанокерамике плоская трещина длиной l , рост которой под действием внешней растягивающей нагрузки опасен для целостности нанокерамического образца. Для простоты положим, что трещина ориентирована перпендикулярно направлению действия внешней нагрузки σ_0 , т.е. является трещиной нормального отрыва (рис. 1). Такая геометрия трещины наиболее опасна для целостности деформируемого образца. В системе координат, изображенной на рис. 1, трещина распространяется вдоль оси x и расположена в области $0 < x < l$. В отсутствие трещины действие растягивающей нагрузки σ_0 приводит к возникновению в нанокерамике в плоскости, образующей угол α с осью x (рис. 1), сдвигового напряжения $\tau_\alpha = (\sigma_0/2) \sin 2\alpha$, ко-

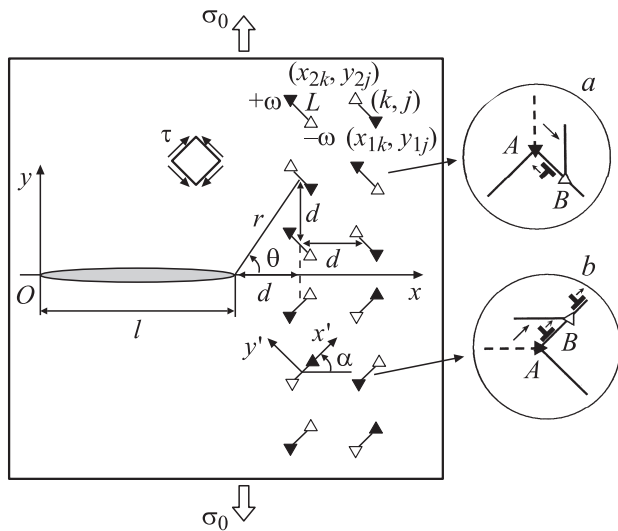


Рис. 1. Геометрия ансамбля дисклинационных диполей, образующихся вблизи вершины микротрещины в результате межзеренного скольжения. Вставки *a* и *b* иллюстрируют процесс межзеренного скольжения, приводящего к образованию дисклинационных диполей.

торое достигает максимального по модулю значения $|\tau_\alpha| = \sigma_0/2$ при $\alpha = \pi/4$ и $3\pi/4$. Действие в нанокерамике высоких сдвиговых напряжений приводит к межзеренному скольжению, которое может влиять на рост трещины.

Для анализа влияния межзеренного скольжения на рост трещины найдем направления наиболее интенсивного зернограничного скольжения вблизи вершины этой трещины. Естественно полагать, что такие направления близки к направлениям действия максимальных сдвиговых напряжений вблизи вершины трещины. Для определения указанных направлений введем систему координат (x', y') , полученную путем поворота системы координат (x, y) на угол α против часовой стрелки (рис. 1). Пусть σ_{ij}^c представляет собой поле напряжений, создаваемое в материале с трещиной внешней сдвиговой нагрузкой σ_0 . Используя выражения (см., например, [11]) для поля напряжений σ_{ij}^c , построим зависимость сдвиговой компоненты $\tau_c = \sigma_{x'y'}^c$ поля напряжения σ_{ij}^c от угла α и расстояния r , которое откладывается от вершины трещины под углом θ к направлению ее распространения (рис. 1). На рис. 2 представлен результат численного расчета зависимости $\tau_c(\alpha, r)/\sigma_0$ для случаев $\theta = \pi/4$ (рис. 2, *a*) и $\theta = -\pi/4$ (рис. 2, *b*). Из рис. 2, *a* следует, что при $\theta = \pi/4$ сдвиговое напряжение τ_c достигает наибольшего абсолютного значения 0.8 GPa вблизи вершины трещины (на расстоянии $r \approx 0.2l$ от нее) в плоскостях, ориентированных под углами, близкими к $\alpha = 3\pi/4$. Для случая $\theta = -\pi/4$ (рис. 2, *b*) максимальные значения сдвиговых напряжений достигаются при $\alpha \approx \pi/4$. Небольшое отклонение направлений максимальных сдвиговых напряжений от углов $\alpha = \pi/4$ и $3\pi/4$ имеет место лишь вблизи вершины трещины, в

области $r < l/10$ (не показанной на рис. 2). Следовательно, при $\theta = \pm\pi/4$ направления действия максимальных сдвиговых напряжений в материале с трещиной нормального отрыва примерно совпадают с направлениями максимального сдвигового напряжения τ_α в отсутствие трещины. Вдоль таких направлений межзеренное скольжение осуществляется наиболее интенсивным образом при прочих равных условиях.

Для выявления влияния зернограничного скольжения на рост трещины будем для простоты рассматривать область $-\pi/2 < \theta < \pi/2$ перед фронтом трещины, поскольку в данной области концентрация трещиной сдвиговых напряжений имеет наибольшую величину. Анализ показывает, что в указанной области максимальные значения сдвиговых напряжений достигаются в случаях $\alpha \approx \pi/4$ или $\approx 3\pi/4$ не только при $\theta = \pm\pi/4$, но и при других значениях угла θ . При этом в области $\theta > 0$ (выше оси x на рис. 1) максимальные значения сдвиговых напряжений достигаются при $\alpha \approx 3\pi/4$, а в области $\theta < 0$ (ниже оси x на рис. 1) максимальные значения сдвиговых напряжений достигаются при $\alpha \approx \pi/4$. Поэтому для удобства расчетов в первом приближении будем полагать, что зернограничное сколь-

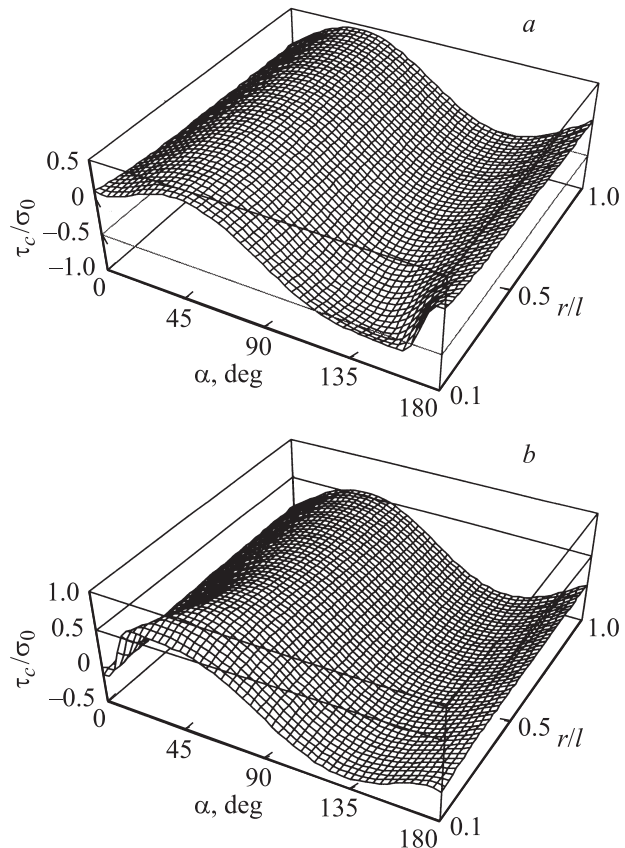


Рис. 2. Зависимость безразмерного сдвигового напряжения τ_c/σ_0 , создаваемого внешней растягивающей нагрузкой σ_0 в материале с трещиной, от угла α , характеризующего направления сдвига, и безразмерного расстояния r/l от вершины трещины для $\theta = \pi/4$ (*a*) и $-\pi/4$ (*b*).

жение в области $\theta > 0$ происходит исключительно вдоль границ зерен, образующих с осью x углы, близкие к $\alpha = 3\pi/4$, а в области $\theta < 0$ — исключительно вдоль границ зерен, образующих с осью x углы, близкие к $\alpha = \pi/4$. Для простоты будем также предполагать, что величина относительного смещения соседних зерен при межзеренном скольжении одинакова для всех границ и равна L .

Согласно [12], межзеренное скольжение приводит к образованию дипольной клиновидной дисклинации (линейных дефектов ротационного типа). Мощности образующихся дисклинаций равны по модулю углам разориентации границ наклона, перемещающихся при межзеренном скольжении, а величины плеч диполей (расстояния между дисклинациями одного диполя) равны по модулю перемещениям соответствующих границ [12]. На рис. 1 вставки a и b иллюстрируют перемещения границ зерен, вызванных межзеренным скольжением и сопровождающиеся образованием диполей клиновидных дисклинаций.

Таким образом, межзеренное скольжение, реализующееся под действием внешней растягивающей нагрузки σ_0 и концентрации напряжений у вершины трещины, приводит к образованию ансамблей дисклинационных диполей, которые в свою очередь оказывают влияние на рост трещины. В общем случае ансамбль дисклинационных диполей характеризуется большим количеством параметров (в частности, типом и мощностями дисклинаций, расстояниями между диполями, величинами плеч диполей, ориентациями диполей), которые могут быть различны для разных диполей и зависят от геометрии зерен, а также структуры, типа и разориентаций их границ. Точный учет всех этих параметров является чрезвычайно сложной задачей. Ее анализ выходит за рамки настоящей работы, основой предмет которой — изложение идеи о новом (специфическом для наноматериалов) микромеханизме повышения трещиностойкости нанокерамик и его приближенном теоретическом исследовании. Для приближенной оценки влияния межзеренного скольжения на трещиностойкость нанокристаллических керамик мы ограничимся рассмотрением периодически упорядоченного модельного ансамбля дисклинационных диполей, который состоит их двенадцати диполей с одинаковыми плечами L и мощностями дисклинаций $\pm\omega$ (рис. 1). Будем считать, что центры диполей образуют квадратную сетку со стороной d , а их плечи ориентированы под углом $\pi/4$ или $3\pi/4$ по отношению к плоскости трещины (рис. 1). Ориентация этих диполей совпадает с направлениями максимального сдвигового напряжения τ_c , а сами диполи расположены вблизи трещины в той зоне, где эти сдвиговые напряжения наиболее велики (и, как следствие, межзеренное скольжение наиболее интенсивно). При этом знаки диполей в рассматриваемом ансамбле чередуются, как показано на рис. 1.

Рассмотрим, какое влияние оказывает такой модельный ансамбль дисклинаций (рис. 1) на рост трещины. Для этого рассчитаем критическую длину трещины l'_c ,

раскрывающейся под действием только внешнего растягивающего напряжения σ_0 , и сравним ее с критической длиной l_c трещины, рассчитанной с учетом напряжений, создаваемых ансамблем дисклинационных диполей. Следует отметить, что под критической длиной трещины понимается длина, при которой начинается катастрофический рост трещины. Увеличение критического размера трещины уменьшает вероятность ее катастрофического роста, тогда как снижение критического размера увеличивает вероятность развития такой трещины в материале. Следовательно, в случае $l_c > l'_c$ трещиностойкость материала увеличивается, а в случае $l_c < l'_c$ уменьшается.

3. Критическая длина трещины

Рассчитаем критическую длину l_c внутризеренной трещины, развивающейся под действием внешнего напряжения σ_0 и поля напряжений ансамбля дисклинационных диполей, изображенного на рис. 1. Для расчета воспользуемся силовым критерием (см., например, [13])

$$K_I(l = l_c) = K_{IC}, \quad (1)$$

где K_I — коэффициент напряжений, рассчитывающийся по формуле [13]

$$K_I(l) = \sqrt{\frac{2}{\pi l}} \int_0^l \sigma_{yy}(x, y, = 0) \sqrt{\frac{x}{l-x}} dx, \quad (2)$$

σ_{yy} — компонента тензора напряжений, создаваемых внешней нагрузкой и ансамблем дисклинационных диполей в отсутствие трещины, а K_{IC} — критическое значение коэффициента интенсивности напряжений. Для случая трещины нормального отрыва в изотропной среде имеем

$$K_{IC} = \sqrt{\frac{4\gamma G}{1-\nu}}, \quad (3)$$

где γ — удельная энергия поверхности берегов трещины.

Напряжение σ_{yy} , входящее в формулу (2) можно, представить в виде $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}^d + \sigma_0$, где σ_{yy}^d — компонента тензора напряжений, создаваемых ансамблем дисклинационных диполей, изображенных на рис. 1. Как видно из рис. 1, рассматриваемый ансамбль диполей симметричен относительно плоскости $y = 0$. Используя выражения [14] для полей напряжений клиновидных дисклинаций в изотропной бесконечной среде, нетрудно показать, что в отсутствие трещины симметрично расположенные диполи создают в плоскости $y = 0$ одинаковые компоненты yy поля напряжений. Поэтому напряжение $\sigma_{yy}^d(x, y = 0)$ может быть получено умножением на 2 величины компоненты yy суммарного поля напряжений, создаваемых в отсутствие трещины верхними диполями.

Обозначим диполи, расположенные выше оси x , номерами (k, j) , как показано на рис. 1. Компоненту yy

поля напряжений диполя с номером (k, j) в отсутствие трещины обозначим как σ_{yy}^{kj} . Координаты правой нижней и левой верхней дисклинаций диполя с номером (k, j) обозначим (x_{1k}, y_{1j}) и (x_{2k}, y_{2j}) соответственно. Эти координаты определяются выражениями $x_{1k} = l + kd - (L/2) \cos \alpha$, $y_{1j} = (j - 1/2)d - (L/2) \sin \alpha$, $x_{2k} = l + kd + (L/2) \cos \alpha$ и $y_{2j} = (j - 1/2)d + (L/2) \sin \alpha$ (рис. 1). При указанных обозначениях напряжение $\sigma_{yy}^d(x, y = 0)$, создаваемое в отсутствие трещины ансамблем дисклинационных диполей, изображенных на рис. 1, рассчитывается с помощью выражений [14] для поля напряжений клиновой дисклинации в изотропной бесконечной среде по формуле

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^d(x, y = 0) &= 2 \sum_{k=1}^3 \sum_{j=1}^2 \sigma_{yy}^{kj}(x, y = 0) \\ &= 2D\omega \sum_{k=1}^3 \sum_{j=1}^2 (-1)^{k+j} \left(\frac{(x - x_{1k})^2}{(x - x_{1k})^2 + y_{1j}^2} - \frac{(x - x_{2k})^2}{(x - x_{2k})^2 + y_{2j}^2} + \frac{1}{2} \ln \frac{(x - x_{2k})^2 + y_{2j}^2}{(x - x_{1k})^2 + y_{1j}^2} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Теперь критическая длина l_c микротрещины рассчитывается численно с помощью формул (1)–(4). В частном случае $\omega = 0$, когда зернограничное скольжение отсутствует и $\sigma_{yy}(x, y) = \sigma_0$, из формул (1)–(3) получаем известное выражение для критической длины $l'_c = l_c(\omega = 0)$ трещины нормального отрыва, раскрывающейся только под действием внешней растягивающей нагрузки,

$$l'_c = \frac{8G\gamma}{\pi(1-\nu)\sigma_0^2}. \quad (5)$$

Анализ влияния на величину l_c зернограничного скольжения, а также параметров дисклинационного ансамбля для случая нанокристаллической керамики 3C-SiC будет произведен в следующем разделе.

4. Влияние параметров дисклинационного ансамбля на критическую длину микротрещины в нанокристаллической керамике 3C-SiC

С помощью формул (1)–(4) проведем расчет критической длины l_c трещины, растущей по действием нагрузки и внешнего напряжения, на типичном примере нанокристаллической керамики 3C-SiC (кубическая фаза карбида кремния). В расчете используем следующие характеристики нанокерамики 3C-SiC: $G = 217$ GPa, $\nu = 0.23$ [15] и $\gamma = 1.5$ J/m² [16]. Зависимости l_c/l'_c от мощности ω дисклинационных диполей и расстояния d между соседними диполями представлены соответственно на рис. 3

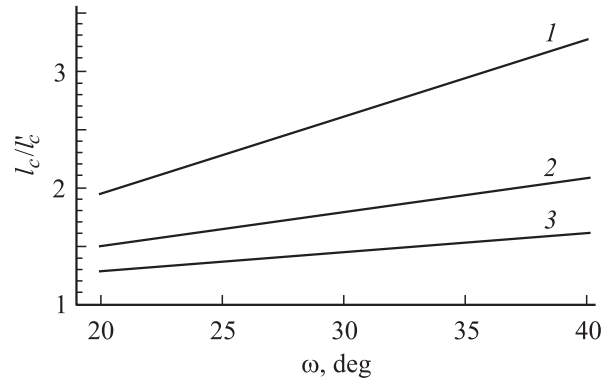


Рис. 3. Зависимости отношения l_c/l'_c критических длин трещины при наличии и отсутствии межзеренного скольжения соответственно от мощности ω дисклинационных диполей для различных значений d . d , nm: 1 — 10, 2 — 20, 3 — 50.

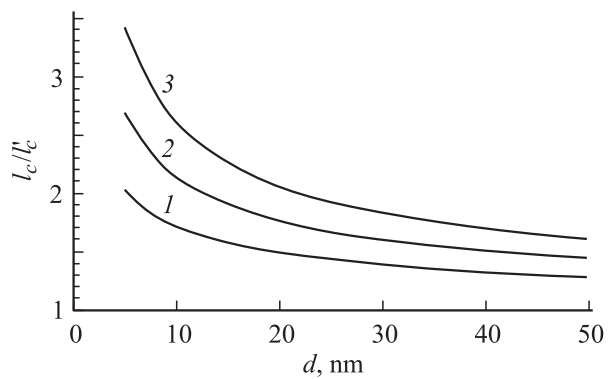


Рис. 4. Зависимости отношения l_c/l'_c критических длин трещины при наличии и отсутствии межзеренного скольжения соответственно от расстояния d между дисклинационными диполями при различных значениях мощности ω . ω , deg: 1 — 20, 2 — 30, 3 — 40.

и 4 для случая $\sigma_0 = 1$ GPa и $L = 2$ nm. Из зависимости на рис. 3 и 4 видно, что зернограничное скольжение вблизи вершины трещины существенно увеличивает критическую длину l_c этой трещины. При этом критическая длина трещины растет с увеличением мощности ω дисклинационных диполей и уменьшением расстояния d между ними. Поэтому межзеренное скольжение улучшает терциностойкость нанокристаллической керамики 3C-SiC. Этот эффект становится особенно заметным при малых размерах зерен (приводящих к малым значениям расстояния d между дисклинационными диполями) и высоких значениях разориентаций (ω) границ зерен.

5. Заключение

Таким образом, межзеренное скольжение в деформируемых нанокерамиках приводит к образованию дисклинационных диполей, которые могут частично снимать высокие упругие напряжения, действующие у вершин

трещин. Поэтому межзеренное скольжение может приводить к увеличению критической длины трещины, при превышении которой начинается ее катастрофический рост, и тем самым улучшать трещиностойкость нанокерамик. Увеличение критической длины трещины и связанное с ней повышение трещиностойкости становится особенно существенно при очень малых размерах нанозерен и высоких значениях углов разориентации их границ.

Отметим, что межзеренное скольжение является одним из доминирующих механизмов пластической деформации в нанокерамиках [4,5]. В то же время в нанокерамиках неэффективны механизмы трещиностойкости, связанные с испусканием решеточных дислокаций из вершин трещин, действующие во многих металлических материалах. Поэтому межзеренное скольжение является механизмом повышения трещиностойкости, специфичным для нанокерамик, и не играет заметной роли в поликристаллических керамиках или металлах.

Список литературы

- [1] J.D. Kuntz, G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee. *MRS Bull.* **29**, 22 (2004).
- [2] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. *ФТТ* **47**, 793 (2005).
- [3] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев. *ФТТ* **47**, 816 (2005).
- [4] I. Szlufarska, A. Nakano, P. Vashista. *Science* **309**, 911 (2005).
- [5] X.Ху, Т. Nishimura, N. Hirotsaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka. *Acta Mater.* **54**, 255 (2006).
- [6] В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Н.Н. Песченская, А.Е. Романов, Б.И. Смирнов, И.А. Александров, Н.А. Еникеев, В.У. Казыханов, А.А. Назаров. *ФТТ* **49**, 644 (2007).
- [7] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. *ФТТ* **49**, 252; 830 (2007).
- [8] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 961; 2161 (2007).
- [9] S. Veprek, A.S. Argon. *J. Vac. Sci. Technol.* **20**, 650 (2002).
- [10] С.С. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural nanocrystalline materials: Fundamentals and applications*. Cambridge University Press, Cambridge (2007). 364 p.
- [11] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. Препринт ИПМаш РАН № 159 (2007).
- [12] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 171 927 (2007).
- [13] *Механика разрушения и прочность материалов / Под ред. В.В. Панасюка. Наук, думка, Киев (1988). Т. 1. 488 с.*
- [14] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. *Дислокации в кристаллах. Наука, Л., (1986). 224 с.*
- [15] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.*
- [16] S.P. Mehandru, A.B. Anderson. *Phys. Rev. B* **42**, 9040 (1990).