

Перенос пластической деформации через аморфную межкристаллитную фазу в нанокерамиках

© С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько

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

E-mail: ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 18 февраля 2008 г.)

Предложена трехмерная теоретическая модель переноса пластической деформации через аморфную межкристаллитную фазу в механически нагруженных нанокерамиках. В рамках модели дислокационные петли скольжения, поджатые приложенным локальным сдвиговым напряжением к межкристаллитным аморфным границам, инициируют в них локальные продольные пластические сдвиги, что приводит к испусканию новых дислокационных петель скольжения в соседние зерна. Рассчитаны энергетические характеристики этих процессов и критические значения приложенного напряжения, необходимые для безбарьерного зарождения зернограницных и внутризеренных петель. В качестве примера рассмотрена нанокерамика на основе кубического карбида кремния. Показано, что перенос пластической деформации через аморфную межкристаллическую фазу в такой нанокерамике энергетически выгоден и может проходить атермически в широком диапазоне значений приложенного напряжения и структурных характеристик материала.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (контракт 02.513.11.3190 Программы „Индустрия наносистем и материалов“), Программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций“ и Санкт-Петербургского научного центра РАН.

PACS: 61.46.-w, 62.25.+g, 81.05.Je

1. Введение

Наноструктурные твердые тела обладают комплексом уникальных физических и механических свойств, которые обусловлены особенностями их структуры (см., например, [1–12]). В частности, пластическая деформация в нанокристаллических металлах и керамиках осуществляется только при очень высоких значениях внешнего механического напряжения. Вместе с тем в большинстве случаев степень их пластической деформации до разрушения ε_f составляет лишь несколько процентов [1,2]. Низкие значения величины ε_f , характеризующей пластичность твердого тела, существенно ограничивают практическое применение этих высокопрочных материалов. Важную роль в оптимизации механических характеристик нанокристаллических керамик играет перенос пластической деформации от одного кристаллита к другому через межкристаллитную фазу, которая имеет аморфную структуру во многих керамических системах. Физические механизмы такого переноса пока не определены из-за сложности их экспериментальной идентификации, что вызывает особый интерес к их теоретическому исследованию. Основная цель настоящей работы — разработка теоретической модели переноса пластической деформации через аморфную межкристаллитную фазу в механически нагруженных нанокерамиках.

2. Модель

Рассмотрим трехмерную дислокационную модель переноса пластической деформации от одного кристаллита к другому через аморфную межкристаллитную

фазу (рис. 1). Пусть изначально в зерне I имеется дислокационная петля скольжения, поджатая к тройному стыку границ зерен I, II и III локальным приложенным сдвиговым напряжением, которое максимально и равно τ в плоскости аморфной границы (прослойки) между зернами II и III (рис. 1, a). Под действием упругого поля этой петли и приложенного напряжения τ в некотором продольном сечении аморфной границы происходит пластический сдвиг, ограниченный прямоугольником $ABCD$ (рис. 1, b). В рамках используемого континуального описания прямоугольную область пластического сдвига $ABCD$ можно представить как прямоугольную дислокационную петлю скольжения. Для определенности будем считать, что ее отрезки AB , BC , CD и AD лежат на краях аморфной прослойки и по существу принадлежат соответственно примыкающим кристаллическим зернам. Это позволяет рассматривать отрезки AB и CD как обычные дислокации в кристаллах, способные участвовать в характерных дислокационных реакциях слияния и расщепления, которые важны для переноса пластического течения между различными фазами. При определенных условиях, которые исследованы далее, фронтальный отрезок петли CD может скользить в зерне IV (рис. 1, c). Предложенная схема (рис. 1) описывает перенос пластической деформации из зерна I в зерно IV через аморфную границу между зернами II и III как процесс последовательного формирования дислокационных петель скольжения.

Выделим особенности локальной пластической деформации в аморфной межзеренной границе. Известно, что пластическая деформация в металлических стеклах при высоких температурах [13] и в аморфном крем-

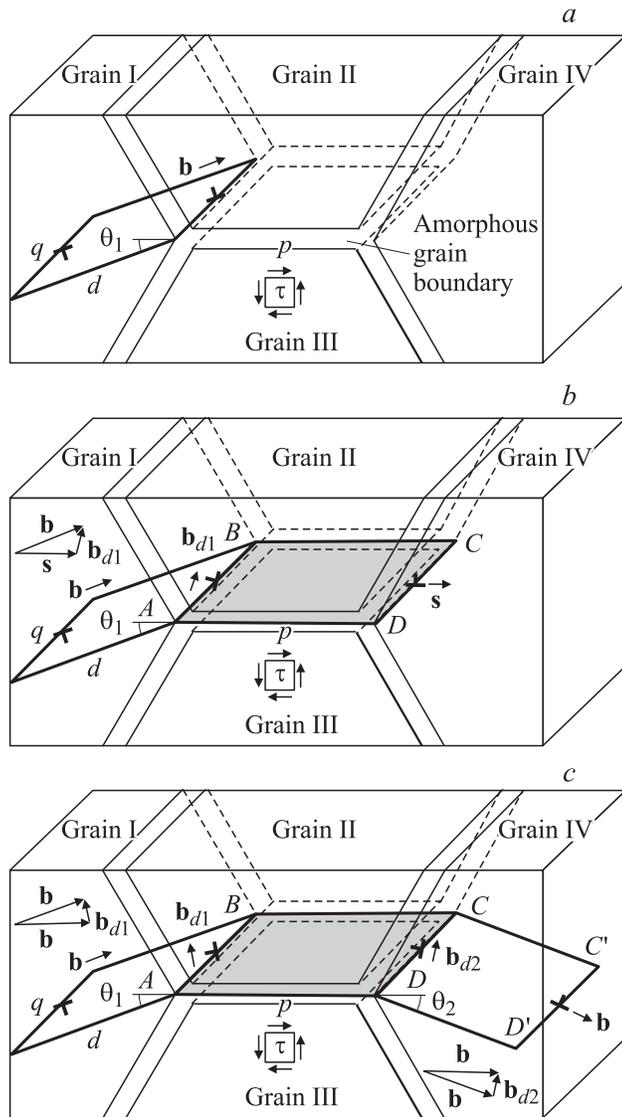


Рис. 1. Трехмерная модель переноса пластической деформации от одного зерна нанокерамики к другому через аморфную межзеренную границу. *a* — исходная прямоугольная дислокационная петля скольжения с решеточным вектором Бюргерса \mathbf{b} в зерне I поджата к тройному стыку границ зерен I, II и III локальным приложенным сдвиговым напряжением τ ; \mathbf{b} — на исходной петле в результате локальных сдвигов в продольном сечении $ABCD$ аморфной границы между зернами II и III зарождается новая дислокационная петля скольжения с некристаллографическим вектором Бюргерса \mathbf{s} ; *c* — испускание дислокационной петли скольжения $CDC'D'$ с решеточным вектором Бюргерса \mathbf{b} в зерно IV.

нии [14–16] осуществляется за счет отдельных локальных пластических сдвигов. Такие сдвиги представляют собой локальные перестройки структуры атомных кластеров, имеющих избыточный свободный объем и пониженное сопротивление сдвигу по сравнению со своими соседями [13–16]. Типичной модельной системой для аморфных керамических структур с ковалентными межатомными связями может служить аморфный

кремний [14–16]. Согласно [14–16], будем считать, что локальная пластическая деформация в сечении $ABCD$ аморфной межзеренной границы (рис. 1) также осуществляется за счет отдельных локальных пластических сдвигов. Локальные пластические сдвиги возникают пространственно-неупорядоченным образом во всем сечении $ABCD$ и приводят к постепенному увеличению модуля s вектора Бюргерса неподвижной дислокационной петли в процессе ее зарождения и эволюции (рис. 1). Похожие модели зарождения дислокационных петель и других дислокационных конфигураций путем идеального наноскопического сдвига предложены для гам-металла (Gum Metal) [17], нанокристаллических материалов [18–20] и поликристаллического кремния [21]. Таким образом, в процессе зарождения дислокационной петли $ABCD$ ее вектор Бюргерса s непрерывно нарастает по модулю от 0 до величины вектора Бюргерса полной решеточной или частичной дислокации. Сама петля при этом остается неподвижной. После формирования дислокационной петли $ABCD$ ее фронтальный сегмент CD становится частичной или полной решеточной дислокацией и может скользить в зерне IV (рис. 1, *c*), завершая перенос пластической деформации от зерна I к зерну IV через аморфную межкристаллическую фазу.

3. Изменение энергии системы при переносе пластической деформации через аморфную межкристаллическую фазу

В соответствии с приведенным в предыдущем разделе геометрическим описанием перенос пластической деформации через аморфную границу зерен состоит из двух этапов: 1) зарождение дислокационной петли в аморфной прослойке на исходной петле решеточной дислокации; 2) эмиссия дислокационной петли в соседнее зерно. В рамках предложенной модели каждый из этих этапов сводится к зарождению новой прямоугольной дислокационной петли скольжения на одном из отрезков уже существующей аналогичной петли. Энергетические характеристики такой схемы подробно рассматривались в работах [22,23], результатами которых мы и воспользуемся.

Сначала рассмотрим этап 1 — образование дислокационной петли в аморфной границе. Пусть исходная прямоугольная дислокационная петля скольжения с решеточным вектором Бюргерса \mathbf{b} имеет размеры $d \times q$, где d — размер зерна, а ее плоскость образует угол θ_1 с плоскостью границы между зернами II и III (рис. 1). Предположим также, что поджатый к тройному стыку отрезок AB этой петли является чисто краевым. Под действием упругого поля петли и локального приложенного сдвигового напряжения τ на этом отрезке зарождается новая прямоугольная дислокационная петля скольжения с вектором Бюргерса \mathbf{s} и размерами $p \times q$, где p — длина границы между зернами II и III. В результате

образования новой петли отрезок AB превращается в отрезок разностной краевой дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b}_{d1} , модуль которого можно определить по теореме косинусов $b_{d1} = \sqrt{b^2 + s^2 - 2bs \cos \theta_1}$.

Изменение полной энергии системы ΔW_1 в результате зарождения новой дислокационной петли на одном из отрезков исходной петли можно записать как

$$\Delta W_1 = W_1 - W_0 - A_1, \quad (1)$$

где W_0 — энергия начальной конфигурации (исходной дислокационной петли), W_1 — энергия конечной конфигурации, A_1 — работа внешнего напряжения τ по зарождению новой дислокационной петли. Полная энергия начальной конфигурации состоит из упругой энергии исходной дислокационной петли W_{s0} и энергии ее ядра W_{c0} :

$$W_0 = W_{s0} + W_{c0}. \quad (2)$$

Энергию системы в конечном состоянии можно представить как сумму

$$W_1 = W_{s1} + W_{s1} + W_{int1} + W'_{c0} + W'_{c1} + W_{c1}^d, \quad (3)$$

где W_{s1} — упругая энергия новой петли, W_{int1} — энергия упругого взаимодействия между исходной и новой дислокационными петлями, W'_{c0} — суммарная энергия ядер трех отрезков исходной петли, которые не изменяются при зарождении новой петли, W'_{c1} — энергия ядер трех новых отрезков зарождающейся дислокационной петли, W_{c1}^d — энергия ядра разностного отрезка с вектором Бюргерса \mathbf{b}_{d1} . Тогда изменение энергии ΔW_1 принимает вид

$$\Delta W_1 = W_{s1} + W_{int1} + W'_{c0} - W_{c0} + W'_{c1} + W_{c1}^d - A_1. \quad (4)$$

В выражение (4) входят собственная энергия прямоугольной дислокационной петли скольжения и энергия взаимодействия двух таких прямоугольных петель между собой. Собственная упругая энергия W_s прямоугольной петли скольжения с размерами $p \times q$ и вектором Бюргерса \mathbf{b} , ориентированным вдоль отрезков длиной p , определяется выражением [24]:

$$W_s(b, p, q) = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ (2-\nu)(r-p-q) + q \ln \frac{2pq}{r_c(r+q)} + (1-\nu)p \ln \frac{2pq}{r_c(r+p)} \right\}. \quad (5)$$

Здесь G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, $r = \sqrt{p^2 + q^2}$, $r_c \approx b$ — радиус ядра дислокации. Энергия упругого взаимодействия двух прямоугольных дислокационных петель скольжения с плоскостями, образующими угол α , с размерами $p_1 \times q$ и $p_2 \times q$, с векторами Бюргерса \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 , направленными соответственно вдоль сторон p_1 и p_2 , и с общим отрезком длиной q

рассчитывается по формуле [22]:

$$\begin{aligned} W_{int}(b_1, b_2, p_1, p_2, q, \alpha) = & -\frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-\nu)} \\ & \times \left\{ \cos \alpha \left(L - R + r + h - q - p_1 - p_2 + q \ln \frac{2p_2q}{r_c(h+q)} \right) \right. \\ & + \frac{p_1}{2L^2} \left[2p_2L(\cos \alpha + \cos^2 \alpha + 2\cos^4 \alpha) - 8L(L-p_1)\cos^3 \alpha \right. \\ & \left. \left. + p_2R(1-\cos \alpha) \right] + [1-\cos 4\alpha - 2(1-\nu)\cos 2\alpha] \right. \\ & \times \frac{p_1}{2} \ln \frac{(L+p_1\cos \alpha+p_2)(r+p_1\cos \alpha)}{(R+p_1\cos \alpha+p_2)(1+\cos \alpha)p_1} \\ & + \frac{p_1^2 \{ \sin \alpha [\sin 2\alpha + 4\sin 3\alpha] + \cos \alpha - \cos^2 \alpha \} - 2q^2 \cos \alpha}{2q} \\ & \times \ln \frac{L(r+q)}{p_1(R+q)} + \frac{q^2 \cos \alpha (\cos \alpha - 1) + p_1^2 \sin^2 \alpha \times [\cos 2\alpha - \cos \alpha - 8\cos^2 \alpha \cos 2\alpha]}{2q \sin \alpha} \\ & \times \left(\arctg \frac{q(p_2+p_1\cos \alpha)}{Rp_1\sin \alpha} - \arctg \frac{q}{r \operatorname{tg} \alpha} \right) \\ & - (1-\nu)\cos 2\alpha \left[p_2 \ln \frac{(L+p_2\cos \alpha+p_1)(h+p_2\cos \alpha)}{(R+p_2\cos \alpha+p_1)(1+\cos \alpha)p_2} \right. \\ & \left. - \frac{q}{\sin \alpha} \left(\frac{\pi}{2} - \alpha - \arctg \frac{q[p_2-(R-p_1)\cos \alpha]}{\sin \alpha [r^2-p_1(R-p_2\cos \alpha)]} \right) \right. \\ & \left. \left. + \arctg \frac{p_2-h\cos \alpha}{q \sin \alpha} - \arctg \frac{q}{r \operatorname{tg} \alpha} \right) \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

Здесь $L = \sqrt{p_1^2 + 2p_1p_2\cos \alpha + p_2^2}$, $R = \sqrt{L^2 + q^2}$, $h = \sqrt{p_2^2 + q^2}$. Используя (5) и (6), можно записать:

$$W_{s1} = W_s(s, d, q), \quad W_{int} = W_{int}(b, s, d, p, q, \theta_1). \quad (7)$$

Энергии ядер в (4) задаются стандартными приближенными формулами [25]:

$$\begin{aligned} W'_{c0} - W_{c0} = & -\frac{Gb^2q}{4\pi(1-\nu)}, \\ W'_{c1} = & \frac{Gs^2}{4\pi(1-\nu)} [2p(1-\nu) + q], \quad W_{c1}^d = \frac{Gb_{d1}^2q}{4\pi(1-\nu)}. \quad (8) \end{aligned}$$

Работу A_1 локального приложенного напряжения τ по зарождению дислокационной петли $ABCD$ площадью $S = pq$ можно определить как

$$A_1 = (\tau - \tau_a)sS = (\tau - \tau_a)spq, \quad (9)$$

где τ_a — предел текучести аморфной фазы, который характеризует ее сопротивление пластическому сдвигу в сечении $ABCD$. Это слагаемое введено по аналогии с различными факторами, определяющими сопротивление дислокационному скольжению в кристаллах [26,27]. Таким образом, найдены все слагаемые в правой части (4).

После того как вектор Бюргера \mathbf{s} достигнет величины решеточного вектора Бюргера \mathbf{b} , зародившаяся петля может проникнуть в тело соседнего зерна IV (рис. 1, *c*). Этот процесс (этап 2) описывается аналогично зарождению новой дислокационной петли скольжения на уже существующей. Однако в данном случае в отличие от предыдущего этапа 1 испускаемая в кристаллическое зерно дислокационная петля $DCD'C'$ имеет фиксированный решеточный вектор Бюргера \mathbf{b} , а ее фронтальный отрезок $D'C'$ способен скользить, изменяя площадь петли. Положим, что плоскость испускаемой петли составляет угол θ_2 с плоскостью $ABCD$ (рис. 1, *c*). Отрезок CD , на котором происходит зарождение новой петли, превращается в отрезок разностной дислокации с вектором Бюргера \mathbf{b}_{d2} , равным по модулю $b_{d2} = 2b \sin(\theta_2/2)$. По аналогии с (4) изменение энергии ΔW_2 на этапе 2 относительно энергии дефектной конфигурации, сформировавшейся на этапе 1, можно записать в виде

$$\Delta W_2 = W_{s2} + W_{\text{int}2} + W'_{c1} - W_{c1} + W'_{c2} + W_{c2}^d - A_2. \quad (10)$$

Здесь W_{s2} — собственная упругая энергия зарождающейся петли $DCD'C'$, $W_{\text{int}2}$ — энергия упругого взаимодействия между дислокационными петлями $ABCD$ и $DCD'C'$, $W'_{c1} - W_{c1}$ — изменение энергии ядер петли $ABCD$ за счет исчезновения отрезка CD с вектором Бюргера \mathbf{b} , W_{c2}^d — энергия ядра появившегося на его месте отрезка CD разностной дислокации с вектором Бюргера \mathbf{b}_{d2} , W'_{c2} — энергия ядер трех новых отрезков зарождающейся дислокационной петли $CDC'D'$, A_2 — работа напряжения τ по зарождению новой петли $CDC'D'$, равная $A_2 = \tau b x q \cos 2\theta_2$, где x — переменная длина этой петли (рис. 1, *c*). При расчете ΔW_2 мы пренебрегаем взаимодействием петель, лежащих в зернах I и IV, поскольку поля упругих напряжений и деформаций дислокационных петель очень быстро убывают с расстоянием r от них: r^{-3} [25].

Энергии W_{s2} и $W_{\text{int}2}$ рассчитываются с помощью формул (5) и (6). Подобно (7) получаем

$$W_{s2} = W_s(b, x, q), \quad W_{\text{int}2} = W_{\text{int}}(b, b, p, x, q, \theta_2). \quad (11)$$

Энергию ядер записываем аналогично (8) в виде

$$W'_{c1} - W_{c1} = -\frac{Gb^2q}{4\pi(1-\nu)},$$

$$W'_{c2} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}[2x(1-\nu) + q], \quad W_{c2}^d = \frac{Gb_{d2}^2q}{4\pi(1-\nu)}. \quad (12)$$

Таким образом, с помощью формул (5), (6), (10)–(12) можно вычислить изменение энергии ΔW_2 .

4. Результаты расчетов

Рассчитаем изменение энергии ΔW_1 и ΔW_2 на примере нанокристаллического кубического карбида кремния (3C-SiC), используя следующие значения пара-

метров: $G = 217$ GPa, $\nu = 0.23$ [28], параметр решетки $a = 4.36$ Å [29], решеточный вектор Бюргера $b = a/\sqrt{2} = 3.08$ Å. Положим также, что $d = q = 50$ nm.

Предел текучести аморфной фазы τ_a в общем случае зависит от температуры, поскольку локальные пластические сдвиги в аморфной фазе могут происходить с помощью термофлуктуаций. Для определенности рассмотрим деформацию при низкой температуре, когда роль термофлуктуаций незначительна. В этом случае предел текучести аморфной фазы (для которой обычная зависимость напряжение–деформация близка к кривой, характерной для идеального упруго-пластического материала) связан с твердостью по Вickersу H_V феноменологическим соотношением вида $\tau_a \approx H_V/6$ [30]. Согласно данным экспериментов [31] и результатам моделирования методами молекулярной динамики [32], твердость аморфного SiC составляет величину $H_V \approx 30$ GPa, что дает $\tau_a \approx 5$ GPa.

На рис. 2 построены типичные зависимости $\Delta W_1(s)$ для случая зарождения дислокационной петли в аморфной границе длиной $p = 20$ nm при $\theta_1 = 0^\circ$ для разных значений напряжения τ . Видно, что по достижении определенного критического напряжения τ_{c1} зависимость $\Delta W_1(s)$ становится монотонно убывающей, т.е. образование дислокационной петли с решеточным вектором Бюргера оказывается энергетически выгодным и не требует преодоления никакого барьера. Это критическое напряжение легко определить аналитически, используя в качестве критерия комбинацию условия отрицательности изменения энергии при $s/b > 0$ и условия минимума на кривой $\Delta W_1(s)$ в точке $s/b = 1$ при $\tau = \tau_{c1}$:

$$\begin{cases} \Delta W_1(s) < 0, & s/b > 0, \\ \frac{\partial \Delta W_1}{\partial s} = 0, \quad \frac{\partial^2 \Delta W_1}{\partial s^2} > 0, & s/b = 1. \end{cases} \quad (13)$$

Как видно из рис. 2, первое условие системы (13) выполняется уже и при τ , существенно меньших τ_{c1} . Второе

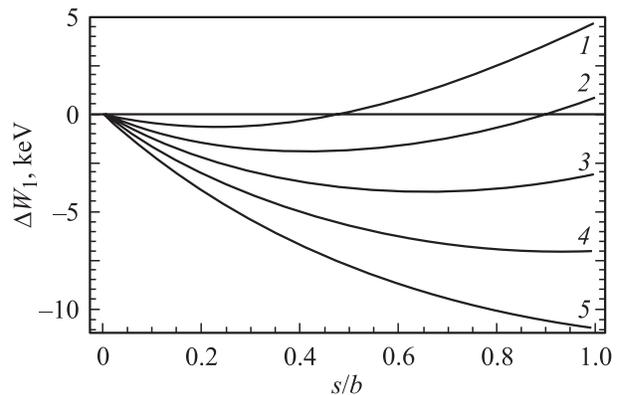


Рис. 2. Зависимость изменения энергии системы ΔW_1 в результате зарождения дислокационной петли в аморфной межзеренной границе нанокерамики 3C-SiC от модуля вектора Бюргера петли s при $p = 20$ nm и $\theta_1 = 0^\circ$. Значения приложенного напряжения $\tau = 4$ (1), 6 (2), 8 (3), 10 (4) и 12 GPa (5).

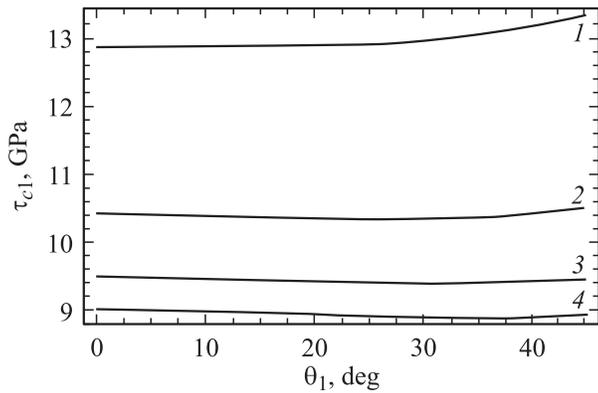


Рис. 3. Зависимость критического напряжения τ_{c1} , необходимого для безбарьерного зарождения дислокационной петли в аморфной межзеренной границе, от угла θ_1 в нанокерамике 3C-SiC. Длина аморфной межзеренной границы $p = 10$ (1), 20 (2), 30 (3) и 40 nm (4).

условие этой системы сразу дает общее выражение для самого τ_{c1} :

$$\tau_{c1} = \tau_a + \frac{1}{pq} \frac{\partial}{\partial s} \{ W_{s1} + W_{int1} + W'_{c0} - W_{c0} + W'_{c1} + W_{c1}^d \} \Big|_{s=b}. \quad (14)$$

Тривиальное дифференцирование в правой части равенства (14) позволяет переписать это равенство в виде громоздкой формулы, которую мы здесь не приводим, сразу переходя к изложению результатов численных расчетов. Эти расчеты показывают, что основным параметром, определяющим величину критического напряжения τ_{c1} , является длина аморфной границы p . На рис. 3 представлены зависимости $\tau_c(\theta_1)$ для различных значений p . Видно, что с ростом p критическое напряжение τ_{c1} быстро уменьшается. С другой стороны, τ_{c1} очень слабо зависит от угла θ_1 , что объясняется выбором ориентации приложенного напряжения τ вдоль (и поперек) плоскости зарождающейся петли. В [22] зависимость критического напряжения зарождения новой петли на отрезке старой была очень сильной, но в предложенной авторами модели напряжение τ было приложено в плоскости старой петли. Это означает, что основной вклад в ориентационную зависимость τ_{c1} вносит работа приложенного напряжения по зарождению новой петли, а не энергия упругого взаимодействия между старой и новой петлями и не энергия ядра их общего отрезка, поскольку в модели [22] все эти три компонента полной энергии зависели от угла между плоскостями петель, а в настоящей модели — только два последние. Анализируя значения критического напряжения τ_{c1} , можно сделать вывод, что они достаточно велики (в частности, значительно превышают предел текучести τ_a для аморфной фазы SiC), однако достижимы в экспериментах по indentированию такой нанокерамики.

На рис. 4 показаны типичные зависимости $\Delta W_2(x)$, построенные для разных уровней внешнего напряжения τ при $p = 20$ nm и $\theta_2 = 0^\circ$. При относительно малых значениях τ функция $\Delta W_2(x)$ монотонно возрастает (кривая 1), при средних — сначала растет, затем достигает максимума, а потом монотонно убывает (кривые 2 и 3), при больших — сразу монотонно убывает (кривая 4). Это означает, что при относительно малых и средних τ , меньших некоторого критического значения τ_{c2} , испускание дислокационной петли в тело зерна либо всегда энергетически невыгодно (кривая 1), либо может быть выгодно, но требует преодоления некоторого энергетического барьера (кривые 2 и 3), величина которого зависит от τ . При $\tau \geq \tau_{c2}$ испускание дислокационной петли становится выгодным и не требует преодоления энергетического барьера (кривая 4). Из рис. 4 видно, что в данном примере $\tau_{c2} \approx 1.6$ GPa. Для аналитического определения τ_{c2} естественно потребовать, чтобы в начальной расчетной точке $x = b + b_{d2}$ (где уже можно использовать решения линейной теории упругости) при $\tau = \tau_{c2}$ выполнялись условия:

$$\begin{cases} \Delta W_2(x = b + b_{d2}) \leq 0, \\ \left. \frac{\partial \Delta W_2}{\partial x} \right|_{x=b+b_{d2}} = 0, \quad \left. \frac{\partial^2 \Delta W_2}{\partial x^2} \right|_{x=b+b_{d2}} < 0. \end{cases} \quad (15)$$

Из рис. 4 видно, что первое условие системы (15) выполняется уже при $\tau < \tau_{c2}$ (кривая 3). Второе условие дает общее выражение для τ_{c2} :

$$\tau_{c2} = \frac{1}{bq \cos 2\theta_2} \left\{ \frac{Gb^2}{2\pi} + \frac{\partial}{\partial x} [W_{s2} + W_{int2}] \Big|_{x=b+b_{d2}} \right\}, \quad (16)$$

которое справедливо, если $\partial^2 [W_{s2} + W_{int2}] / \partial x^2 < 0$ при $x = b + b_{d2}$. Не приводя здесь громоздкого окончательного выражения для τ_{c2} , перейдем сразу к рассмотрению результатов численного расчета.

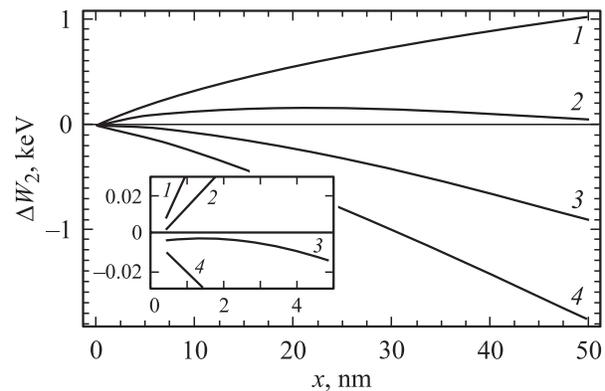


Рис. 4. Зависимость изменения энергии системы ΔW_2 в результате испускания дислокационной петли в тело зерна нанокерамики 3C-SiC от длины петли x при $p = 20$ nm и $\theta_2 = 0^\circ$. Значения приложенного напряжения $\tau = 1.2$ (1), 1.4 (2), 1.6 (3) и 1.8 GPa (4). На вставке показано поведение кривых в области малых длин x .

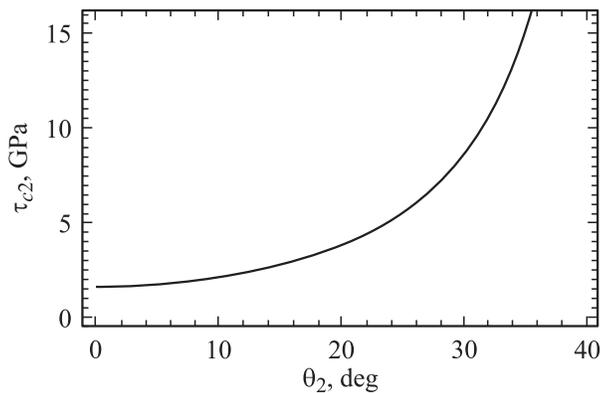


Рис. 5. Зависимость критического напряжения τ_{c2} , необходимого для безбарьерного испускания дислокационной петли в тело зерна нанокерамики 3C-SiC, от угла θ_2 при $p = 20$ nm.

Зависимость $\tau_{c2}(\theta_2)$ показана на рис. 5 для значения параметра $p = 20$ nm. Отметим, что τ_{c2} очень слабо зависит от p , и кривые на рис. 5, формально рассчитанные для $p = 20$ nm, справедливы для всего диапазона изменения p от 10 до 40 nm. Напротив, как сразу видно из формулы (16), критическое напряжение τ_{c2} сильно зависит от угла θ_2 . Аналогичные ориентационные зависимости критических напряжений испускания дислокационных петель были получены в работе [22]. Сравнивая величины τ_{c1} (рис. 3) и τ_{c2} (рис. 5), можно сделать вывод, что $\tau_{c1} > \tau_{c2}$ при любых значениях p из интервала от 10 до 40 nm и угла $\theta_2 < 30^\circ$. Таким образом, уровня сдвигового напряжения, достаточного для безбарьерного зарождения дислокационной петли в аморфной прослойке, достаточно и для последующего испускания дислокации в соседнее зерно. При этом необходимо учитывать, что высокий барьер Пайерлса, характерный для керамических материалов (здесь для 3C-SiC), будет препятствовать испусканию дислокационных петель при низких температурах. Анализ этого обстоятельства выходит за рамки настоящей работы.

5. Заключение

Таким образом, в настоящей статье предложена трехмерная теоретическая модель, описывающая механизм переноса пластической деформации от одного зерна нанокерамики к другому путем зарождения и развития дислокационных петель скольжения в аморфных межзеренных границах. На примере нанокерамики на основе кубического карбида кремния определены условия, при которых энергетически выгодны формирование таких петель и последующее испускание дислокационных петель скольжения в соседние зерна. Рассчитаны критические значения τ_{c1} и τ_{c2} локального приложенного сдвигового напряжения в межзеренной границе, первое из которых необходимо для безбарьерного формирования петли в границе, а второе — для безразмерного

же испускания петли в соседнее зерно. Показано, что критическое напряжение τ_{c1} уменьшается с увеличением длины аморфной границы p , в то время как напряжение τ_{c2} очень слабо зависит от этого параметра. С другой стороны, критическое напряжение τ_{c2} сильно зависит от угла испускания дислокационной петли. Можно сделать общий вывод, что эффективный перенос пластической деформации в нанокерамике возможен при высоком уровне локальных сдвиговых напряжений, существенно (в 2 и более раз) превышающих сопротивление пластическому сдвигу в аморфной межзеренной границе, и подходящей ориентировке соседнего зерна, когда плоскость скольжения в зерне отклоняется от плоскости этой границы не более чем на 30° .

Список литературы

- [1] K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven, S. Suresh. *Acta Mater.* **51**, 5743 (2003).
- [2] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson. *Progr. Mater. Sci.* **51**, 427 (2006).
- [3] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *Adv. Phys.* **55**, 627 (2006).
- [4] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Plastic deformation in nanocrystalline materials*. Springer, Berlin (2004).
- [5] В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Н.Н. Песчанская, А.Е. Романов, Б.И. Смирнов, И.А. Александров, Н.А. Еникеев, В.У. Казыханов, А.А. Назаров. *ФТТ* **49**, 644 (2007).
- [6] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **49**, 961; 2161 (2007).
- [7] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. *ФТТ* **49**, 252 (2007).
- [8] H. Klostermann, F. Fierzke, T. Modes, O. Zywitzki. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **15**, 33 (2007).
- [9] С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько. *ФТТ* **49**, 1044 (2007).
- [10] В.И. Бетехтин, А.Г. Кадомцев, V. Sklenicka, I. Saxl. *ФТТ* **49**, 1787 (2007).
- [11] A. Akbari, J.P. Riviere, C. Templier, E. Le Bourhis, G. Abadias. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **15**, 111 (2007).
- [12] О.В. Клявин, В.И. Николаев, Б.И. Смирнов, Л.В. Хабарин, Ю.М. Чернов, В.В. Шпейзман. *ФТТ* **49**, 1590 (2007).
- [13] A.S. Argon. *Acta Mater.* **27**, 47 (1979).
- [14] M.J. Demkowicz, A.S. Argon. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 025 505 (2004).
- [15] M.J. Demkowicz, A.S. Argon. *Phys. Rev. B* **72**, 245 205 (2005).
- [16] M.J. Demkowicz, A.S. Argon. *Phys. Rev. B* **72**, 245 206 (2005).
- [17] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **54**, 2489 (2006).
- [18] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 211 901 (2006).
- [19] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *ФТТ* **50**, 630 (2008).
- [20] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **56** (2008); doi: 10.1016/j.actamat.2007.12.004.
- [21] S.V. Bobylev, N.F. Morozov, I.A. Ovid'ko. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **13**, 77 (2006).

- [22] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Phil. Mag.* **86**, 1483 (2006).
- [23] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Phys. Rev. B* **73**, 064 102 (2006).
- [24] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman. *Phys. Status Solidi B* **241**, 1810 (2004).
- [25] J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of dislocations*. Wiley, N.Y. (1982). 857 p.
- [26] U.F. Kocks, A.S. Argon, M.F. Ashby. *Progr. Mater. Sci.* **19**, 1 (1975).
- [27] E. Nadgornyi. *Progr. Mater. Sci.* **31**, 1 (1988).
- [28] Z. Ding, S. Zhou, Y. Zhao. *Phys. Rev. B* **70**, 184 117 (2004).
- [29] J. Kräußlich, A.J. Bauer, B. Wunderlich, K. Goetz. *Mater. Sci. Forum* **353–356**, 319 (2001).
- [30] S. Veprek, S. Mukherjee, P. Karvankova, H.-D. Mannling, J.L. He, K. Moto, J. Prochazka, A.S. Argon. *J. Vac. Sci. Technol. A* **21**, 532 (2003).
- [31] M.A.E. Khakani, M. Chaker, A. Jean, S. Boily, J.C. Kieffer, M.E. O'Hern, M.F. Ravet, F. Rousseaux. *J. Mater. Res.* **9**, 96 (1994).
- [32] I. Szlufarska, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 021 915 (2005).