

<https://doi.org/10.26160/2474-5901-2023-38-28-35>

ЗАВИСИМОСТЬ НАПРЯЖЕНИЯ ТЕЧЕНИЯ ОТ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В БИМОДАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛАХ С НАНОДВОЙНИКОВАННОЙ СТРУКТУРОЙ

Скиба Н.В.

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

Ключевые слова: бимодальные нанодвойникованные материалы, пластическая деформация, нанодвойники, напряжение течения, предел текучести, дислокации.

Аннотация. Разработана теоретическая модель пластической деформации бимодальных ультрамелкозернистых/нанокристаллических (УМЗ/НК) материалов с нанодвойниковой структурой в крупных зернах. В рамках модели, пластическая деформация осуществляется за счет последовательного роста толщины периодически распределенных нанодвойников. Рассчитана теоретическая зависимость напряжения течения от степени пластической деформации и произведена оценка предела текучести. Произведено сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными на примере нанодвойникованной меди (Cu).

DEPENDENCE OF FLOW STRESS ON PLASTIC DEFORMATION IN BIMODAL MATERIALS WITH NANOTWINNED STRUCTURE

Skiba N.V.

*Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,
Saint-Petersburg, Russia*

Keywords: bimodal nanotwinned materials, plastic deformation, nanotwins, flow stress, yield stress, dislocation.

Abstract. A theoretical model of the plastic deformation of bimodal ultrafine-grained/nanocrystalline (UFG/NC) materials with a nanotwinned structure in large grains has been developed. Within the model, the plastic deformation occurs due to the consequent growth of periodically distributed nanotwins. The theoretical dependence of the flow stress on the degree of the plastic deformation is calculated and an estimate of the yield strength is obtained. The theoretical results are compared with experimental data in the exemplary case of nanotwinned copper (Cu).

1. Введение

Измельчение структуры до наноскопического размера, как правило, сопровождается повышением прочности и сильным снижением пластичности материала, что существенно ограничивает сферу практического использования наноструктурных материалов [1]. В первую очередь, это связано с затруднением решеточного скольжения (являющегося основным механизмом пластической деформации в крупнозернистых материалах) из-за повышения плотности некогерентных границ зерен, которые выступают в роли препятствий для скольжения решеточных дислокаций [1]. В настоящее время, разработаны различные методы улучшения пластических характеристик наноструктурных материалов. Одним из этих методов является создание бимодальной структуры, когда в ультрамелкозернистую/

нанокристаллическую матрицу внедряются крупные зерна микронного размера. В экспериментальных работах [2] показано, что создание бимодальной структуры приводит к существенному повышению пластичности исходных УМЗ/НК материалов при относительно небольшом снижении прочности. С другой стороны, присутствие в УМЗ/НК материалах когерентных границ раздела (например, границ двойников), может способствовать упрочнению материала при сохранении высоких пластических характеристик. Например, в экспериментальных работах [3] по исследованию деформационного поведения мелкозернистой меди (Cu), внутрь зерен, которой были внедрены нанодвойниковые прослойки, было отмечено существенное увеличение прочности образцов с сохранением высоких пластических свойств по сравнению с образцами, не содержащими нанодвойников [3]. Высокие пластические свойства образцов, насыщенных нанодвойниками, объясняется присутствием на двойниковых границах большого числа частичных дислокаций, которые способны двигаться вдоль этих границ, обеспечивая развитие пластической деформации в нанодвойникованных УМЗ/НК материалах. С учетом этих данных, можно предположить, что создание нанодвойникованной структуры в крупных зернах бимодальных материалов способно значительно повысить пластичность УМЗ/НК материалов при одновременном сохранении высокой прочности.

Таким образом, основной целью настоящей работы является разработка теоретической модели, которая описывает деформационное поведение бимодальных материалов с нанодвойникованной структурой, с построением зависимости напряжения течения от степени пластической деформации и оценкой предела текучести.

2. Модель

Рассмотрим механически нагруженный металлический образец с бимодальной структурой, состоящей из ультрамелкозернистой матрицы и крупных зерен, которые содержат ансамбли наноразмерных двойников (рис. 1,а). Для простоты описания, представим идеализированную двумерную модель бимодального нанодвойникового металлического образца под действием одноосной растягивающей нагрузки σ (рис. 1,а). Несмотря на свою простоту, модель отражает основные физические особенности режима пластического течения и влияние дисклинационных конфигурации, которые формируются на границах зерен в результате трансформации нанодвойникованной структуры. В модели, рассматривается типичное для бимодального нанодвойникового материала модельной зерно, которое содержит N одинаковых нанодвойников, распределенных с периодом l_0 , и имеющих ширину h_0 и длину d (рис. 1,б).

В рамках модели, внешнее сдвиговое напряжение τ действует вдоль границ двойников и вызывает скольжение частичных дислокаций (дислокаций Шокли) вдоль этих границ. При скольжении такой дислокации вдоль всей границы нанодвойника толщина двойника увеличивается на

расстояние δ между соседними кристаллографическими плоскостями скольжения. Согласно экспериментальной работе [3] этот режим деформации, связанный с расширением двойников, может существенно способствовать пластическому течению в нанодвойниковой меди.

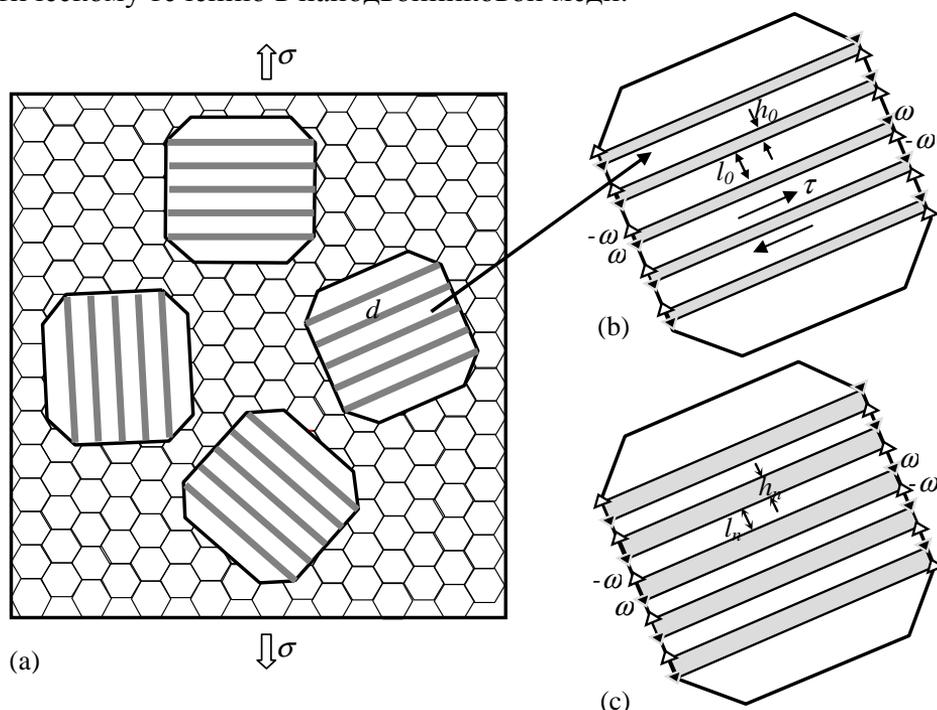


Рис. 1. Модель пластической деформации бимодального нанодвойникового образца за счет расширения нанодвойников: (а) – бимодальный образец с нанодвойниковой структурой; (б) – увеличенная вставка нанодвойникового зерна, содержащего исходную структуру из N нанодвойников; (с) – система из N нанодвойников после n -ого расширения нанодвойниковых прослоек

Расстояние δ между соседними плоскостями скольжения $\{111\}$ связано с параметром решетки a следующим отношением: $\delta = a/\sqrt{3}$. В рамках модели дислокации Шокли представляют собой чисто краевые дислокации типа $(a/6)\langle 11\bar{2} \rangle$, с модулем вектора Бюргерса b равным $b = a/\sqrt{6}$. Поле напряжений, создаваемое каждым нанодвойником, может быть эффективно описано полем напряжения дисклинационного квадруполя с мощностью дисклинаций $\pm \omega$ ($\pm \omega$ -дисклинациями) и плечами h_0 и d (рис. 1,б). Согласно теории дисклинаций, мощность ω связана с модулем вектора Бюргерса b дислокации Шокли отношением $\omega = 2 \arctan(b/2\delta)$.

В рамках модели, скольжение частичных дислокаций происходит одновременно по N границам двойников, что приводит к одновременному увеличению толщины нанодвойника на величину δ для всех расположенных внутри зерна нанодвойников. Процесс увеличения толщины нанодвойника может повторяться много раз и, таким образом, вызывать пластическую

деформацию в нанодвойникованном материале. После n актов расширения нанодвойников в зерне формируется N двойников толщиной $h = h_0 + n\delta$ каждый (рис. 1,с). При этом характерное расстояние между соседними двойниками уменьшается до значения $l_n = l_0 - n\delta$ (рис. 1,с). Каждое расширение нанодвойника характеризуется критическим напряжением τ_n^{crit} , определяемым как минимальное внешнее сдвиговое напряжение, при котором процесс расширения нанодвойника энергетически выгоден. Далее рассмотрим энергетические характеристики последовательного роста толщины h нанодвойников.

3. Энергетические характеристики трансформации нанодвойникованной структуры

Рассмотрим энергетические характеристики перехода дефектной системы из $(n-1)$ -ого состояния, которое характеризуется энергией W_{n-1} ансамбля из N нанодвойников толщиной $h_{n-1} = h_0 + (n-1)\delta$ (возникшей в результате последовательной реализации $(n-1)$ -ого элементарного акта увеличения толщины исходных нанодвойников), в n -ое состояние, характеризуемое энергией W_n конфигурацией из N нанодвойников толщиной $h_n = h_0 + n\delta$ (рис. 1,с) (возникшей в результате последовательной реализации n элементарных актов увеличения толщины исходных нанодвойников). Разность полных энергий $\Delta W_n = W_n - W_{n-1}$, характеризующая переход дефектной системы их $(n-1)$ -ого состояния в n -ое состояние может быть записана следующим образом:

$$\Delta W_n = E_n^{self} - E_{n-1}^{self} + E_n^{int} - E_{n-1}^{int} + E_N^\tau, \quad (1)$$

где E_n^{self} и E_{n-1}^{self} – соответственно собственные энергии N квадруполей $\pm\omega$ -дисклинаций в n -ом и $(n-1)$ -ом состояниях; E_n^{int} и E_{n-1}^{int} – соответственно энергия упругих взаимодействий между всеми N квадруполями $\pm\omega$ -дисклинаций в n -ом и $(n-1)$ -ом состояниях; E_N^τ – работа совершаемая внешним сдвиговым напряжением τ по увеличению толщины N нанодвойников на расстояние δ .

Собственные энергии E_n^{self} и E_{n-1}^{self} квадруполей $\pm\omega$ -дисклинаций соответственно даются известными выражениями [4]:

$$E_n^{self} = \frac{NG\omega^2}{4\pi(1-\nu)} \left(h_n^2 \ln \frac{h_n^2 + d^2}{h_n^2} + d^2 \ln \frac{d^2 + h_n^2}{d^2} \right), \quad (2)$$

$$E_{n-1}^{self} = \frac{NG\omega^2}{4\pi(1-\nu)} \left(h_{n-1}^2 \ln \frac{h_{n-1}^2 + d^2}{h_{n-1}^2} + d^2 \ln \frac{d^2 + h_{n-1}^2}{d^2} \right), \quad (3)$$

где $D = G/2\pi(1-\nu)$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона.

Энергия упругого взаимодействия между i -ым и j -ым квадрупольями $\pm \Omega$ -дисклинаций рассчитывается путем зарождения j -ого квадруполья в поле сдвиговых напряжений i -ого квадруполья. Энергии взаимодействия E_n^{int} и E_{n-1}^{int} представляют собой суммарную энергию всех таких парных взаимодействий между дисклинационными квадрупольями и могут быть записаны в виде двойных сумм по индексам i и j :

$$E_n^{\text{int}} = \frac{D\omega^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left((h_n + y_{ij}) \ln \frac{d^2 + (h_n + y_{ij})^2}{(h_n + y_{ij})^2} + (h_n - y_{ij}) \ln \frac{d^2 + (h_n - y_{ij})^2}{(h_n - y_{ij})^2} + \right. \\ \left. d^2 \left(\ln \frac{d^2 + (h_n + y_{ij})^2}{d^2 + y_{ij}^2} + \ln \frac{d^2 + (h_n + y_{ij})^2}{d^2 + y_{ij}^2} \right) - 2y_{ij}^2 \ln \frac{d^2 + y_{ij}^2}{y_{ij}^2} \right), \quad (4)$$

$$E_{n-1}^{\text{int}} = \frac{D\omega^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left((h_{n-1} + y'_{ij}) \ln \frac{d^2 + (h_{n-1} + y'_{ij})^2}{(h_{n-1} + y'_{ij})^2} + (h_{n-1} - y'_{ij}) \ln \frac{d^2 + (h_{n-1} - y'_{ij})^2}{(h_{n-1} - y'_{ij})^2} + \right. \\ \left. d^2 \left(\ln \frac{d^2 + (h_{n-1} + y'_{ij})^2}{d^2 + y'_{ij}{}^2} + \ln \frac{d^2 + (h_{n-1} + y'_{ij})^2}{d^2 + y'_{ij}{}^2} \right) - 2y'_{ij}{}^2 \ln \frac{d^2 + y'_{ij}{}^2}{y'_{ij}{}^2} \right), \quad (5)$$

где $y_{ij} = (j-i)(h_n + l_n)$, $y'_{ij} = (j-i)(h_{n-1} + l_{n-1})$.

Энергия E_N^τ дается стандартной формулой:

$$E_N^\tau = -N\tau\delta d. \quad (6)$$

С помощью формул (1)-(6) составим выражение для разности полной энергии ΔW_n системы, характеризующей n -ый элементарный акт роста толщины нанодвойниковых прослоек. Выполнение условия $\Delta W_n < 0$ означает, что переход системы из $(n-1)$ -ого состояния в n -ое сопровождается понижением полной энергии системы, то есть является энергетически выгодным. В модели предполагается, что вдоль плоскости двойниковых границ (плоскости скольжения частичных дислокаций) действует максимальное внешнее сдвиговое напряжение τ , которое, в этом случае, связано с внешним растягивающим напряжением σ следующим соотношением: $\sigma = 2\tau$.

Реализация n -ого элементарного акта становится возможной при достижении внешним сдвиговым напряжением τ некоторой критической величины τ_n^{crit} , которая может быть определена из условия $\Delta W_n = 0$. Используя выражение для критической величины τ_n^{crit} внешнего сдвигового напряжения (полученное из условия $\Delta W_n = 0$), рассчитаем зависимость напряжения течения σ_n от степени пластической деформации ϵ_n . Расчет проведем в предположение, что кроме деформации по механизму миграции двойниковых границ (за счет расширения нанодвойников) в нанодвойникованных зернах (которые имеют микронный размер)

пластическая деформация может также осуществляться за счет скольжения решеточных дислокаций в промежутках между двойниковыми границами в перпендикулярном направлении к плоскости скольжения частичных дислокаций. Вследствие различной ориентации нанодвойников в разных зернах, деформация по механизму роста толщины нанодвойников происходит только в части зерен, в которых ориентация двойниковых границ совпадает или близка к направлению действия максимального внешнего сдвигового напряжения, а в остальной части зерен действует решеточное скольжение. Таким образом, теоретическое значение σ_n^{th} напряжение течения σ может быть оценено с помощью следующей формулы:

$$\sigma_n^{th} = \alpha\sigma_n + (1 - \alpha)\sigma_{HP}, \quad (7)$$

где $\sigma_n = 2\tau_n^{crit}$, $\sigma_{HP} = \sigma_0 + K_{HP}d_m^{-1/2}$ – соотношения Холла-Петча, σ_0 и K_{HP} – индивидуальные для каждого материала константы, d_m – средний размер структуры, на котором осуществляется скольжение, и α – объемная доля материала, которая деформируется за счет расширения нанодвойников.

В рамках модели, пластическая деформация бимодального нанодвойникового образца осуществляется за счет миграции двойниковых границ и решеточного скольжения в больших зернах. В этом случае, оценка величины ε_n пластической деформации с учетом действия этих механизмов пластичности может быть записана в следующем виде:

$$\varepsilon_n \approx \alpha \frac{2nN\delta}{d} + (1 - \alpha) \frac{nb_l}{d}, \quad (8)$$

где $b_l = a/\sqrt{2}$ – величина вектора Бюргерса решеточных дислокаций.

Используя выражение (7) и оценку (8), рассчитаем зависимость напряжения течения σ_n^{th} от степени пластической деформации ε_n на примере бимодальной нанодвойниковой меди Cu, с использованием следующих параметров дефектной системы: $G = 44$ ГПа, $\nu = 0,38$, $a = 352$ нм [5], $\sigma_0 = 200$ МПа, $K_{HP} = 1750$ МПа [6] и $\alpha = 0,6$. В качестве среднего размера нанодвойникованных зерен выберем значение $d = 1000$ нм, а для среднего размера зерна d_m в соотношение Холла-Петча применена оценка: $d_m = l$. Количество N нанодвойников в зерне определялось из выражения $N = \lfloor d/(h_0 + l_0) \rfloor$, где $\lfloor X \rfloor$ целая часть числа X . Расчет теоретических зависимостей $\sigma_n^{th}(\varepsilon_n)$ (сплошные кривые) представлен на рисунке 2 в сравнение с экспериментальными данными (штрихованные кривые) по исследованию нанодвойникованной меди [3] при различных значениях исходных толщин h_0 нанодвойников для случая $l_0 = 15$ нм (рис. 2,а) и $l_0 = 30$ нм (рис. 2,б). Из зависимостей на рисунке 2 видно, что увеличение толщины h_0 исходных нанодвойников и уменьшение начальных расстояний

l_0 между двойниками приводит к росту максимальных значений напряжения течения. Как видно из рисунка 2, лучшее совпадение с экспериментальными данными демонстрируют теоретические зависимости $\sigma_n^{th}(\epsilon_n)$, которые соответствуют меньшему расстоянию $l_0 = 15$ нм между нанодвойниковыми прослойками (рис. 2,а).

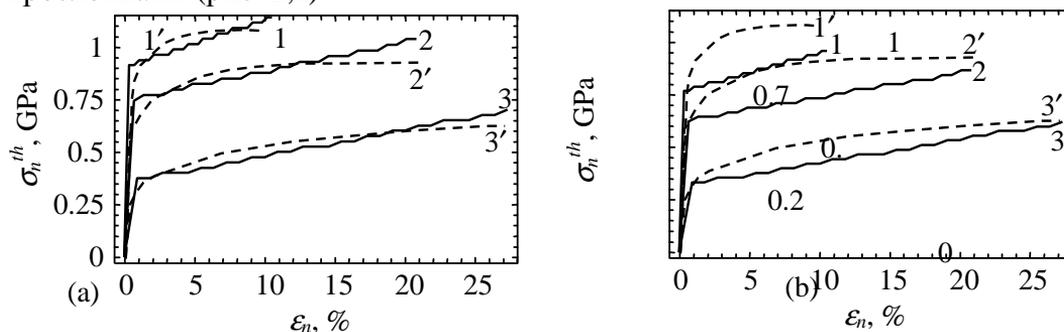


Рис. 2. Зависимость теоретического предела текучести σ_n^{th} от степени пластической деформации ϵ_n в сравнение с экспериментальными данными [3] при различных значениях начальной толщины нанодвойников $h_0 = 15$ нм (кривая 1, 1'), 10 нм (кривая 2, 2'), и 4 нм (кривая 3, 3') для расстояний между нанодвойниками (а) $l_0 = 15$ нм и (б) $l_0 = 30$ нм

Произведем оценку предела текучести σ_y^{th} на примере бимодальной нанодвойникованной меди Cu при тех же значениях параметров дефектной структуры, который выше использовались при расчете зависимостей $\sigma_n^{th}(\epsilon_n)$. В рамках модели, начало необратимой пластической деформации (которой соответствует предел текучести) характеризуется первой трансформацией нанодвойниковой структуры. В результате, теоретический предел текучести может быть рассчитан с помощью соотношения (7) как напряжение $\sigma_y^{th} = \sigma_1^{th}$, которое требуется для осуществления первого расширения нанодвойников на расстояние δ . Таким образом, с помощью формулы (7) (для случая $l_0 = 15$ нм) были рассчитаны следующие величины теоретического предела текучести в зависимости от толщины нанодвойников $h_0 = 4, 8, 10$ и 15 нм: $\sigma_y^{th} = 355, 575, 745$ и 897 МПа, соответственно. Эти теоретические оценки предела текучести демонстрируют хорошее совпадение с экспериментальными данными по УМЗ нанодвойникованной меди Cu [3] $\sigma_y^{exp} = 300, 550, 750$ и 900 МПа при толщине нанодвойников 4, 8, 10 и 15 нм соответственно.

4. Заключение

Таким образом, проведено теоретическое описание пластической деформации бимодальных УМЗ/НК материалов с нанодвойникованной структурой в результате последовательной трансформации ансамблей

нанодвойников и скольжения решеточных дислокаций в крупных зернах. Расчет энергетических характеристик последовательного увеличения толщины нанодвойников за счет скольжения частичных дислокаций вдоль их границ показал энергетическую выгодность данного процесса в широком диапазоне параметров дефектной конфигурации. Получена зависимость предела текучести от степени пластической деформации и проведена оценка предела текучести на примере нанодвойникованной меди Cu. Теоретические результаты демонстрируют хорошее совпадение с экспериментальными данными [3].

Список литературы / References

1. Koch C.C., Ovid'ko I.A., Seal S., Veprek S. Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications – С.: Cambridge University Press, 2007. – 616 p.
2. Wang Y.M., Chen M.W., Zhou F.H., Ma E. High tensile ductility in a nanostructured metal // Nature. 2002, vol. 419, pp. 912-915. doi.org/10.1038/nature01133.
3. Lu L., Chen X., Huang X., Lu K.. Revealing the maximum strength in nanotwinned copper // Science. 2009, vol. 323, pp. 607-610. doi.org/10.1126/science.1167641.
4. Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Application of disclination concept to solid structures // Progress in Materials Science. 2009, vol. 54, pp. 740-769. doi.org/10.1016/j.pmatsci.2009.03.002.
5. Hirth J.P, Lothe J. Theory of Dislocations – N.-Y.: Wiley, 1982.
6. Masumura R.A., Hazzledine P.M., Pande C.S. Yield stress of fine grained materials // Acta Materialia. 1998, vol. 46, no. 13, pp. 4527-4534. doi.org/10.1016/S1359-6454(98)00150-5.

<p>Скиба Николай Васильевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник</p>	<p>Skiba Nikolai Vasilievich – doctor of physical and mathematical sciences, leading researcher</p>
<p>nikolay.skiba@gmail.com</p>	

Received 02.11.2023