



УДК 539.5:669.268

О. А. Шут

Обобщенная зависимость предела текучести от размера зерна

(Представлено академиком НАН Украины С. А. Фирстовым)

Получено уравнение, описывающее зависимость предела текучести от размера зерен с учетом существования двух критических размеров зерен (d_{cr1} и d_{cr2}), при достижении которых меняется механизм упрочнения. Уравнение включает в себя уравнение Холла-Петча в области $d > d_{cr1}$. В области $d_{cr1} > d > d_{cr2}$ показатель в уравнении Холла-Петча изменяется с $-1/2$ на -1 . В области наноструктур ($d_{cr2} > d$) возможно как разупрочнение (в случае “слабых” границы), так и, напротив, существенное упрочнение (в случае “прочных” границы) при сегрегации некоторых примесей на границах зерен вплоть до достижения предельных значений на уровне теоретической прочности (твердости).

В работах [1–4] и др. показано, что при анализе зависимости предела текучести от размера зерна $\sigma(d)$ следует принимать во внимание существование как минимум трех диапазонов размеров зерен: крупнокристаллических (более 1–10 мкм), субкристаллических и нанозерен (меньше 10 нм). И, соответственно, наличие двух критических размеров зерен, при которых происходят изменения зависимости предела текучести,

$$\sigma_1(d) = \sigma_0 + k_y d^{-1/2}, \quad d > d_{cr1}, \quad (1)$$

$$\sigma_2(d) = \sigma_0 + k_1 d^{-1}, \quad d_{cr1} > d > d_{cr2}, \quad (2)$$

$$\sigma_3(d), \quad d < d_{cr2}. \quad (3)$$

Точное выражение $\sigma_3(d)$ зависимости предела текучести от размера зерна в области наноструктур определяется конкретным механизмом деформации [4]. Для выбора подходящей аналитической зависимости для $\sigma_3(d)$ остановимся на модели, основанной на представлении наноматериала как двухфазного композита (первая фаза — тело зерна, вторая — граница зерна). Для описания третьего участка ($d < d_{cr2}$) $\sigma_3(d)$ могут быть использованы и другие механизмы деформирования, а также их комбинация в зависимости от характеристик материала. Необходимо отметить, что в аналитической форме такие зависимости существуют,

© О. А. Шут, 2014

кроме вышепредложенной модели, для дислокационно-дисклинационной модели и ползучести по Коблу [4]. Дислокационно-дисклинационная модель может быть исключена из рассмотрения, так как перемещение полных дислокаций в середине нанозерен маловероятно. Реализация ползучести по Коблу при комнатной температуре для наноструктурированных материалов требует аномально высоких коэффициентов диффузии.

Для модели наноматериала — композита можно записать [1]:

$$\sigma_3(d) = \left(1 - \left(\frac{d-t}{d}\right)^2\right)\sigma_B + \left(\frac{d-t}{d}\right)^2\sigma_V. \quad (4)$$

Здесь t — толщина границ зерен; σ_B — их прочность; σ_V — прочность тела зерна. Так как прочность бездислокационного нанозерна стремится к предельно возможной (теоретической) для данного материала, можно предположить, что σ_V соответствует теоретической прочности материала. Ценность такого описания в том, что учитывается толщина границы t и ее состояние, что является главным критерием поведения зависимость $\sigma(d)$ в нанобласти. В случае, когда вследствие накопления несплошностей в наноматериалах происходит снижение прочности границ зерен ($\sigma_V > \sigma_B$ — случай “слабых” границ), зависимость $\sigma(d)$ будет спадающей [4]. Когда же вследствие обогащения границ зерен “полезными примесями” прочность границ зерен увеличивается и может превысить прочность тела зерна ($\sigma_B > \sigma_V$ — случай “сильных” границ) [5], возможно усиление зависимости $\sigma(d)$.

Для получения обобщенной зависимости $\sigma(d)$ в широком интервале размеров зерен можно выбрать метод, примененный в [6], где учитывается распределение зерен по объемам в образце $f(V)$. При этом необходимо учесть наличие двух критических размеров зерен, разделяющих области проявления механизмов упрочнения, описываемого формулами (1), (2) и (4). Тогда результирующее напряжение течения всего поликристалла может быть записано в виде

$$\sigma(d) = \frac{1}{m_v} \int_{v_1}^{\infty} \sigma_1 V f(V) dV + \frac{1}{m_v} \int_{v_2}^{v_1} \sigma_2 V f(V) dV + \frac{1}{m_v} \int_0^{v_2} \sigma_3 V f(V) dV, \quad (5)$$

где $V_1 = d_{cr1}^3$; $V_2 = d_{cr2}^3$; $f(V)$ — логнормальный закон распределения зерен по объему в образце; m_v — среднее значение объема зерен.

В связи с частым использованием данных индентирования (результатом которых есть величина твердости H , нормированной на модуль Юнга E) удобно перестроить график зависимости предела текучести в зависимость нормированной величины H/E от размера зерна, где твердость H связана с пределом текучести σ формулой Марша [7].

Строго говоря, в соответствии с уравнением (5) предполагается, что при изменении размера зерна величина k_y и, соответственно, состояние границ не изменяются. Очевидно, однако, что для материала определенной степени чистоты при изменении размера зерна с помощью термической обработки непрерывно изменяется состояние границ зерен. По этой причине экспериментальные данные $\sigma(d)$ ($H/E(d)$) располагаются между двумя кривыми, что отражает различие в величине k_y для каждого размера зерна. На рис. 1 приведены экспериментальные значения H/E для материалов на основе хрома, полученных по различным технологиям [8, 9]. Очевидно, что границы зерен во всех материалах будут отличаться. Нижняя кривая отвечает наиболее низким значениям $k_y = 1,4 \cdot 10^{(-2)}$ ГПа \cdot мм^{3/2} для высокочистого хрома, верхняя — более высокому значению $k_y = 2,83 \cdot 10^{(-2)}$ ГПа \cdot мм^{3/2}.

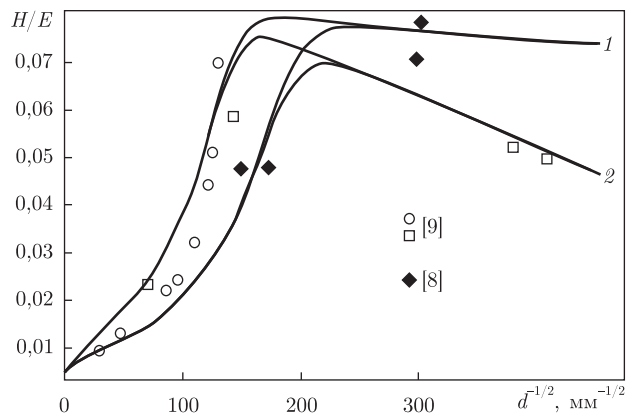


Рис. 1. Зависимости, построенные согласно уравнению (5), пересчитанные в твердость по формуле Марша, для двух величин прочности границ раздела в материалах и для разных величин k_y на основе хрома: 1, 2 — прочности границ зерен $E/30$ и $E/50$ соответственно

Таким образом, полученное обобщенное уравнение зависимости предела текучести от размера зерна сводится в области крупных размеров зерен к обычному уравнению Холла–Петча, описывает переход к более резкой зависимости от размера зерна по закону d^{-1} в области субмикронных размеров зерен и позволяет получить как спадающую зависимость $\sigma(d)$ в области наноразмеров (inverse Hall–Petch relation), так и предсказывает существенное упрочнение при обогащении границ зерен “полезными примесями”. Анализ экспериментальных данных целесообразно проводить, используя серию кривых $\sigma(d)$ (минимум две кривые), чтобы учесть то обстоятельство, что каждая экспериментальная точка может отвечать различным значениям параметров σ_0 и k_y , а каждая расчетная кривая соответствует ситуации, когда эти параметры неизменны вдоль всей кривой.

1. Firstov S. A., Rogul O. A., Shut O. A. Transition from microstructures to nanostructures and ultimate hardening // *Funct. Materials.* – 2009. – **16**, No 4. – P. 364–373.
2. Sevillano J. Gil, van Hottel P., Aernoudt E. Large strain work hardening and textures // *Progress in Materials Sci.* – 1981. – **25**. – P. 69–421.
3. Thompson A. W. Substructure strengthening mechanisms // *Metallurg. Transaction A.* – 1977. – **8A**. – P. 833.
4. Gutkin M. Yu., Ovid'ko I. A., Pande C. S. Theoretical models of plastic deformation processes in nanocrystalline materials // *Rev. Adv. Mater. Sci.* – 2001. – **2**. – P. 80–102.
5. Фирстов С. А., Рогуль Т. Г., Свечников В. Л. и др. Структура, механическое поведение и нанотвердость поликристаллических хромовых и молибденовых покрытий, полученных методом магнетронного распыления // *Металлофизика и новейшие технологии.* – 2003. – **25**, № 9. – С. 1153–1164.
6. Phaniraj M. P., Presad M. J., Chokshi A. H. Grain-size distribution effects in plastic flow and failure // *Mater. Sci. Eng.* – 2007. – **A463**. – P. 231.
7. Marsh D. M. Plastic flow in glass // *Proc. Roy. Soc.* – 1964. – **A279**. – P. 420–435.
8. Фирстов С., Куликовский В., Рогуль Т., Дуб С., Пономарев С., Тимофеев И., Шут О. Механические свойства нанокристаллических пленок хрома с малыми добавками кислорода // *Наноструктурное материаловедение.* – 2011. – № 4. – С. 31–41.
9. Фирстов С. А., Даниленко Н. И., Котко А. В., Саржан Г. Ф., Шут О. А. Структура и микромеханические характеристики сплава Cr-37, 2%Ni // *Там же.* – 2011. – № 13. – С. 104–109.

Институт проблем материаловедения
им. И. Н. Францевича НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 28.04.2014

О. О. Шут

Узагальнена залежність межі текучості від розміру зерна

Отримано рівняння, що описує залежність межі текучості від розміру зерна з урахуванням двох критичних розмірів зерен (d_{cr1} і d_{cr2}), при досягненні яких змінюється механізм зміцнення. Рівняння містить формулу Холла–Петча в області $d > d_{cr1}$. В області $d_{cr1} > d > d_{cr2}$ показник у рівнянні Холла–Петча змінюється з $-1/2$ на -1 . В області наноструктур ($d_{cr2} > d$) існує можливість як знеміцнення (у випадку “слабких” границь зерен), так і, навпаки, істотного зміцнення (у випадку “міцних” границь при сегрегації певних домішок на границях зерен) аж до досягнення граничних значень на рівні теоретичної міцності (твердості).

O. O. Shut

Generalized dependence of the yield stress on the grain size

The generalized equation that describes the yield stress dependence upon the grain size in a wide range of grain sizes has been obtained. There are two critical grain sizes (d_{cr1} , d_{cr2}) that correspond to changes in the strengthening mechanism. The equation includes the Hall–Petch relation in the range $d > d_{cr1}$. For $d_{cr1} > d > d_{cr2}$, the power in the Hall–Petch relation varies from $-1/2$ to -1 . In a nanometer (nm) range ($d_{cr2} > d$), there are the possibilities of softening (in case of “weak” boundaries), as well as significant strengthening (in case of “strong” boundaries).