УДК 532.6:546.22

ОЦЕНКА ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ НАНОЧАСТИЦ НЕКОТОРЫХ МЕТАЛЛОВ

Юров В.М., Лауринас В.Ч., Мукашева Л.С., Гученко С.А.
Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова, Караганда, e-mail: exciton@list.ru

В работе показано, что поведение предела текучести малых частиц определяется величиной их поверхностного натяжения. Показано также, что обратный эффект Холла – Петча обусловлен размерной зависимостью поверхностного натяжения наночастиц, начиная с некоторого критического радиуса. Определяя величину поверхностного натяжения, можно рассчитать предел текучести для металлов. Для ряда металлов результаты таких расчетов приведены в настоящей работе. Из расчетов следует, что предел текучести для частиц размером 0,3–0,5 микрон практически совпадает с соответствующей величиной для массивного образца.

Ключевые слова: прочность, наноструктура, предел текучести, предел упругости, размерный эффект

ASSESSMENT OF YIELD STRENGTH NANOPARTICLES OF SOME METALS

Yurov V.M., Laurinas V.C., Mukasheva L.S., Guchenko S.A.
Karaganda State University named after E.A. Buketov, Karaganda, e-mail: exciton@list.ru

It is shown that the behavior of the yield strength of small particles is determined by their surface tension. It is also shown that the opposite effect due to the Hall-Petch size dependence of the surface tension of the nanoparticles from a certain critical radius. Determining the value of the surface tension, it is possible to calculate the yield stress for metals. For a number of metals results of such calculations are given in this paper. From calculations that yield stress for particle sizes (0.3-0.5) microns is practically identical with the corresponding value for the bulk sample.

Keywords: strength, nanostructure, yield strength, elastic limit, the size effect

В поликристаллических металлах влияние среднего размера зерна d на величину предела текучести $\sigma_т$ принято описывать с помощью соотношения Холла – Петча:

$$\sigma_Т = \sigma_0 + Kd^{-1/2}, \qquad (1)$$

где σ_0 – напряжение, характеризующее сопротивление пластической деформации со стороны кристаллической решетки и дефектов решетки, препятствующих движению решеточных дислокаций; K – коэффициент, характеризующий вклад в упрочнение со стороны границ зерен.

В работе [1] показано, что существует около десятка различных моделей, которые не до конца могут объяснить нарушение закона Холла – Петча (ХП) при размерах зерен меньше критического. Считается, что традиционная деформация по дислокационному механизму в материалах с размером зерна меньше 30 нм невозможна ввиду малой вероятности появления подвижных дислокаций.

Некоторые модели соотношения Холла – Петча

В работах [2, 3] рассмотрено несколько моделей ХП:

– модель «скоплений», объясняющая влияние размера зерна на $\sigma_т$ концентрацией напряжений в скоплениях дислокаций, моделирующих индивидуальные полосы скольжения;

– модель деформационного упрочнения, объясняющая соотношение (1) зависимостью плотности дислокаций или длины их пробега от размера зерна;

– модель, использующая представление об особенностях механизмов работы поверхностных или зернограничных дислокационных источников в процессе передачи скольжения от зерна к зерну;

– модель, базирующаяся на представлениях о двух типах дислокаций – статически запасенных и геометрически необходимых.

Указанные модели позволяют качественно объяснить степенной характер зависимости предела текучести от размера зерна в предположении о постоянстве параметра K. Вместе с тем к настоящему времени накоплен большой объем экспериментальных данных, которые не удается интерпретировать в рамках традиционных представлений о постоянстве параметра K. В частности, в ряде экспериментальных работ обнаружена существенная зависимость коэффициента K от степени и скорости предварительной деформации, температуры и времени предварительного дорекристаллизационного отжига и т.д.

В работах [4, 5] показано, что в наномикрокристаллических металлах (НМК) металлах с размером зерна $d \sim (0{,}1–0{,}2)$ мкм при напряжениях порядка предела текучести дислокационные скопления могут и не

возникать, хотя работа дислокационных источников Франка – Рида возможна.

Вопрос о вкладе зернограничного проскальзывания в общую долю деформации НМК металлов (при комнатной температуре) также весьма неоднозначен и спорен и до настоящего времени остается открытым.

Нарушение закона Холла – Петча экспериментально исследовано в работе [6] и теоретически в работе [7], а также во многих других работах [1–3].

Примером компьютерного моделирования является работа [8], где в рамках инженерии границ зерен выявлены два типа ротационно-волновых потоков, которые определяются углом разориентации смежных зерен. Первый тип зернограничных потоков развивается в малоугловых границах и генерирует в объем зерен дислокации, определяющие прямой эффект Холла – Петча. Второй тип зернограничных потоков развивается в большеугловых границах и приводит к обратному эффекту Холла – Петча.

В работе [9] для предела текучести нами получено

$$\sigma_{\text{Т}} = \sigma_{\text{М}} + C\sigma d^{-1/2}. \qquad (2)$$

Уравнение (2) по форме совпадает с уравнением Холла – Петча (1). Однако коэффициенты пропорциональности в обеих формулах различаются. В рассматриваемом случае поведение предела текучести малых частиц определяется также величиной их поверхностного натяжения σ.

Для малых d А.И. Русанов получил асимптотическую линейную зависимость [10]:

$$\sigma = Kd. \qquad (3)$$

Здесь K – коэффициент пропорциональности. Формула (3) получена на основе термодинамического рассмотрения и должна быть применима к малым объектам различной природы.

В этом случае уравнение (2) принимает вид

$$\sigma_{\text{Т}} = \sigma_{\text{М}} + CKd^{1/2}. \qquad (4)$$

Уравнение (4) представляет собой обратный эффект Холла – Петча. Таким образом, обратный эффект Холла – Петча обусловлен размерной зависимостью поверхностного натяжения наночастиц, начиная с некоторого критического радиуса, значения которого для 55 чистых металлов определены в [9].

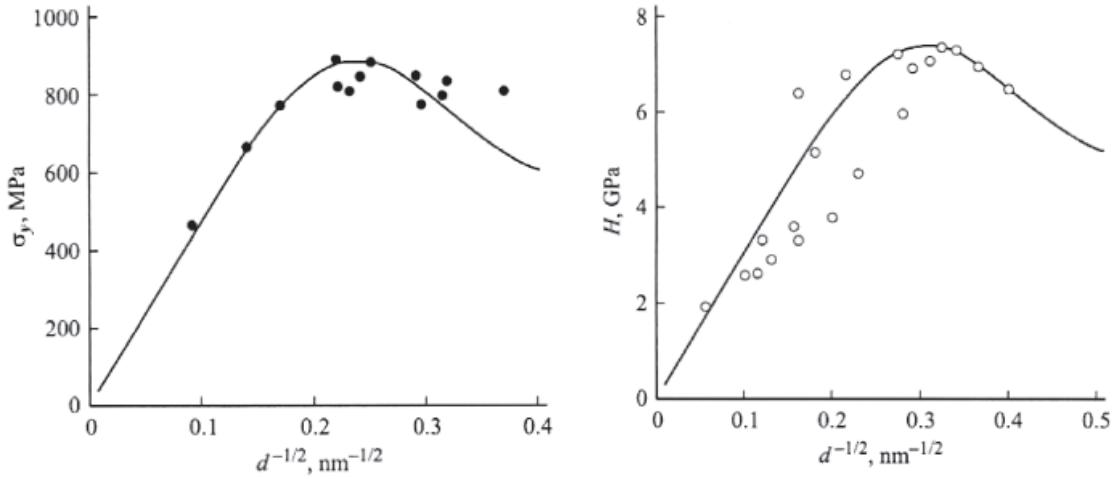
На рисунке показаны зависимости ХП для меди и никеля.

Обработка кривых рисунка с помощью соотношения (2) дала значение постоянной C:

$$C \approx 10^2 \text{ МПа·м}^{1/2}. \qquad (5)$$

Необходимо отметить следующее: постоянная C имеет одно и то же значение для большинства металлов периодической системы элементов. Это позволяет объяснить наблюдаемую зависимость коэффициента K в уравнении ХП от типа металла через различие в величине поверхностного натяжения для различных металлов.

Используя табличные данные по величине $\sigma_{\text{М}}$ [12] и определяя величину поверхностного натяжения по методике [13], мы можем рассчитать предел текучести для тех металлов, для которых известна величина $\sigma_{\text{М}}$. Для ряда металлов результаты таких расчетов приведены в таблице.



а б

Соотношение ХП для предела текучести нанокристаллической меди (а) и микротвердости никеля (б) [11]

Предельная текучесть микро- и наночастиц некоторых металлов

Металл	σ_0, МПа [290]	σ, Дж/м^2	σ_T, МПа d = 16 нм	σ_T, МПа d = 64 нм	σ_T, МПа d = 100 нм	σ_T, МПа d = 225 нм
Алюминий	22	0,653	38	30	28	26
Бериллий	230	1,091	257	244	241	237
Ванадий	106	1,512	144	125	121	112
Вольфрам	760	2,587	825	792	786	777
Гафний	500	1,754	544	529	518	507
Железо	170	1,268	202	186	189	178
Золото	40	0,936	64	56	49	44
Иридий	90–100	1,917	138–148	122–132	109–119	98–108
Ниобий	210	1,919	258	242	229	218
Палладий	60	1,279	92	81	73	65
Платина	70	1,429	106	94	84	76
Родий	70–100	1,567	109–139	96–126	86–116	76–106
Рутений	300–400	1,825	346–446	331–431	318–418	307–407
Серебро	20–30	0,865	42–52	35–45	29-39	23-33

Из таблицы следует, что предел текучести для частиц размером 0,3–0,5 микрон практически совпадает с соответствующей величиной для массивного образца.

Заключение

Изложенный в настоящей работе подход не касается микромеханизмов процессов упрочнения и разупрочнения наноструктур. Однако он может быть полезен для инженерии наноматериалов, поскольку определена явно связь механических свойств наноструктур с их поверхностным натяжением (поверхностной энергией).

Список литературы

1. Малыгин Г.А.. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов (Обзор) // ФТТ. – 2007. – Том. 49. – Вып. 6. – С. 961–982.

2. Андриевский Р.Л., Глезер А.М. Прочность наноструктур // УФН. – 2009. – Т. 179. – № 4. – С. 337–358.

3. Малыгин Г.А. Прочность и пластичность нанокристаллических материалов и наноразмерных кристаллов // УФН. – 2011. – Т. 181. – № 11. – С. 1129–1156.

4. Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Пирожникова О.Э. и др. Стабильность структуры нано- и микрокристаллических материалов, полученных методами интенсивного пластического деформирования. – Нижний Новгород: Изд-во ННГУ, 2006. – 189 с.

5. Нохрин А.В., Чувильдеев В.Н., Смирнова Е.С. и др. Механические свойства нано-и микрокристаллических металлов. – Нижний Новгород: Изд-во ННГУ. – 2007. – 46 с.

6. Юркова А.И., Белоцкий А.В., Бякова А. В., Мильман Ю.В. Механические свойства наноструктурного железа, полученного интенсивной пластической деформацией трением // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2009. – Т. 7. – № 2. – С. 619–632.

7. Закарян Д.А. Наночастицы с алмазоподобной структурой и обратный закон Холла–Петча // Доповіді Національної академії наук України. – 2014. – № 10. – С. 82–86.

8. Панин В.Е., Моисеенко Д.Д., Елсукова Т.Ф. Многоуровневая модель деформируемого поликристалла. Проблема Холла-Петча // Физ. мезомех. – 2013. – Т. 16. – № 4. – С. 15–28.

9. Юров В.М., Лауринас В.Ч., Гученко С.А. Некоторые вопросы физики прочности металлических наноструктур // Межвуз. сб. науч. трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – Тверь: Твер. гос. ун-т., 2013. – Вып. 5. – С. 408–412.

10. Русанов А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. – Л.: Химия, 1967. – 346 с.

11. Вахрушев А.В., Вахрушева Л.Л., Шушков А.А. Численный анализ изменения модуляупругости кристаллических наночастиц металлов под действием разных типов нагрузки // Известия Тульского гос. ун-та. Естественные науки. – 2011. – Вып. 3. – С. 137–150.

12. Таблицы физических величин: справочник / под ред. академика И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.

13. Юров В.М., Ибраев Н.Х., Гученко С.А. Экспериментальное определение поверхностного натяжения наночастиц и нанопленок // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 1/3. – С. 335–340.