

УДК 531.8

## ВКЛАД ЭНЕРГИИ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ НАНОМАТЕРИАЛОВ

© 2016 г. Н. Р. Кудинова<sup>1,\*</sup>, В. А. Полянский<sup>3,\*\*</sup>, А. М. Полянский<sup>2</sup>, Ю. А. Яковлев<sup>1</sup>

Представлено академиком РАН Н.Ф. Морозовым 16.11.2015 г.

Поступило 23.11.2015 г.

Оценена энергия поверхностного натяжения кристаллитов в поликристаллических материалах с различной микроструктурой и в наноматериалах. Выдвинута гипотеза о том, что предел текучести материалов определяется балансом упругой энергии и энергии поверхностного натяжения кристаллитов. Измеренная независимо величина поверхностной энергии позволяет рассчитать оценки предела текучести поликристаллических материалов.

DOI: 10.7868/S0869565216300101

Процесс пластического деформирования сопровождается неупругими потерями энергии. При одноосном растяжении переход к пластическому деформированию происходит после превышения предела текучести. Таким образом, величина предела текучести характеризует потенциальную энергию, необходимую для начала неупругих деформаций материала.

Режим пластического деформирования напоминает деформирование материала в жидкой фазе, но удельные энергии, необходимые для нагревания материала до температуры плавления и полного расплавления, на порядок выше максимальной энергии упругой деформации и максимально возможной пластической деформации вплоть до разрушения материала соответственно. Поэтому феномен пластичности связывают с локализацией энергии внешних сил на дефектах структуры кристаллитов. В ряде работ дислокационный механизм считается основой всех эффектов при пластическом деформировании, в том числе и фазовых переходов, связанных с изменением кристаллической структуры под действием внешних нагрузок.

Дислокационная теория зарождения и развития пластических деформаций приводит к тому, что все механические характеристики сильно за-

висят от плотности дислокаций на поверхности зерен [1]. Эта величина не поддается прямому измерению, поэтому прогностическая ценность дислокационного подхода невелика. Другие подходы, например, мезомеханика [2], описывают пластичность как коллективные дислокационные эффекты.

Имеющиеся модели описания пластичности не являются грубыми. Например величина предела текучести, как и другие механические характеристики металлов хорошо воспроизводятся, что позволяет предположить, что она зависит от их основных фундаментальных свойств.

Помимо изменения предела текучести измельчение структурных элементов сказывается на температуре точки плавления. Для металлических нанопорошков чистых металлов в среде инертного газа происходит снижение температуры плавления при уменьшении размеров наночастиц [3].

Изменение температуры плавления связано с энергией сил поверхностного натяжения, так как вероятность отрыва отдельных атомов и молекул от кристаллита в результате теплового движения возрастает при убывании коэффициента поверхностного натяжения. Экспериментальная зависимость температуры плавления от коэффициента поверхностного натяжения для различных веществ с обычным размером структуры является линейной [4]. Следовательно, межграницное взаимодействие кристаллитов не оказывает сильного влияния на силы поверхностного натяжения при среднем размере кристаллита порядка 100 мкм, и мы можем рассматривать энергию сил поверхностного натяжения кристаллитов как отдельную составляющую внутренней энергии материала. Зная зависимость объемной плотности энергии

<sup>1</sup> Институт проблем машиноведения  
Российской Академии наук, Санкт-Петербург

<sup>2</sup> ОООНПК "Электронные и пучковые технологии"  
Санкт-Петербург

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный  
политехнический университет

\*E-mail: nataliieku@gmail.com

\*\*E-mail: ampol@electronbeamtech.com

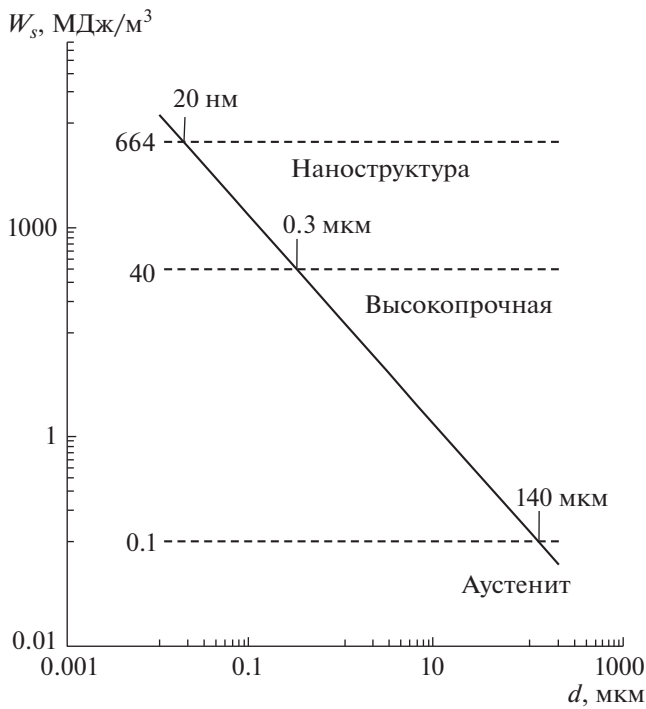


Рис. 1. Зависимость объемной плотности поверхностной энергии от размера кристаллитов.

сил поверхностного натяжения от размера кристаллитов можно предсказывать изменения предела текучести.

Рассмотрим случай квазистатической деформации металла. Будем рассматривать сталь в качестве модельного материала. В этом случае переход от упругой деформации к пластической можно интерпретировать как смену механизма деформации, соответствующую накопленному уровню объемной энергии. Этот уровень объемной энергии можно определить для простых сталей, зная модуль Юнга ( $E = 200$  ГПа) и предел текучести ( $\sigma_s = 200$  МПа), по формуле  $W_1 = \sigma_s^2 / (2E) = 0.1$  МДж/м<sup>3</sup>.

Пластическая деформация происходит при относительно небольшом росте напряжений, поэтому максимальную объемную энергию такой деформации можно оценить, зная предел текучести и максимальное удлинение  $\delta_0$ , которое составляет около 0.2 для простых сталей. Таким образом, максимальная объемная энергия пластической деформации  $W_2 = \sigma_s \delta_0 = 40$  МДж/м<sup>3</sup>. Для сравнения, приведем теплоту плавления сталей. Она составляет  $W_3 = 664$  МДж/м<sup>3</sup>. После достижения первого уровня  $W_1$  при деформации пластическое течение становится энергетически выгодными, на втором уровне  $W_2$  происходит разрушение материала, на третьем  $W_3$  — разрушение дальнего порядка его кристаллической структу-

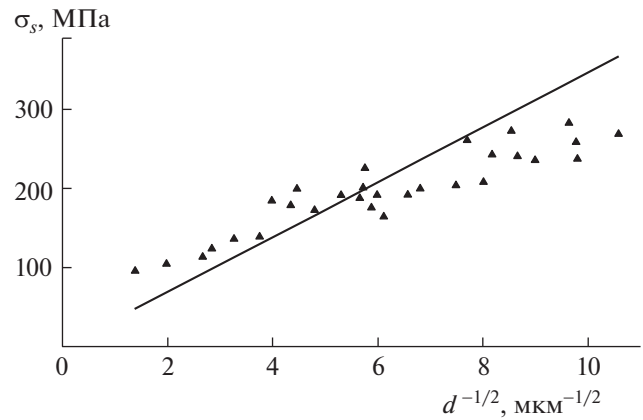
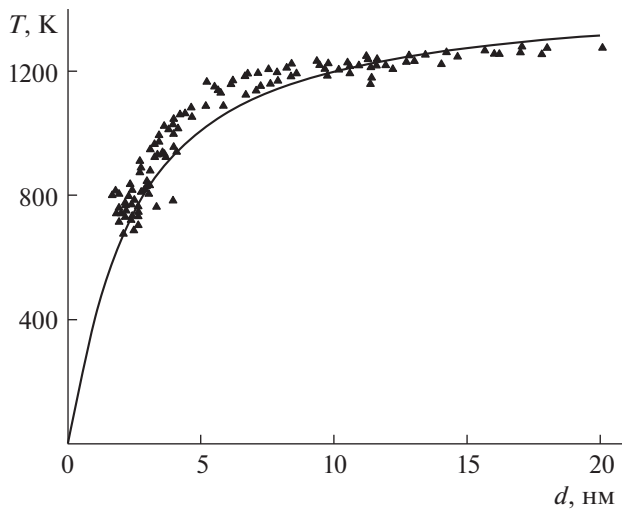


Рис. 2. Экспериментальные данные [5] для стали и аппроксимация, полученная из предположения  $W_S = W_1$ .

ры. Для полного разрушения кристаллической структуры нужна энергия, сопоставимая с теплотой испарения. Ее мы рассматривать не будем, так как она на порядок превосходит теплоту плавления.

Оценим возможный вклад энергии поверхностного натяжения при переходе от упругого к неупругому деформированию. Для приближенной оценки рассмотрим вариант равномерной упаковки кристаллитов в виде сферических (или кубических) блоков и для простоты будем считать малой энергию взаимодействия кристаллитов с межграницным объемом. Объемная плотность  $W_S$  энергии сил поверхностного натяжения с коэффициентом  $\sigma$  в этом случае составит  $W_S = 6\sigma/d$  (где  $d$  — характерный размер кристаллитов). Зададимся средним для металлов с температурой плавления 1300–1700°C значением поверхностной энергии  $\sigma \approx 2$  Дж/м<sup>2</sup>. Тогда можно построить график зависимости  $W_S(d)$ . Для сталей он на рис. 1. Точки пересечения кривой  $W_S$  с уровнями энергий  $W_1, W_2, W_3$  задают размеры кристаллитов, характерные для: обычных аустенитных сталей с пределом текучести  $\sigma_s = 200$  МПа, сталей с мелкодисперсной и сталей с наноструктурой. Для наноструктурной стали брать постоянное значение  $\sigma$  не корректно, так как в этом диапазоне  $\sigma$  сильно зависит от размера частиц.

По графику рис. 1 можно получить оценку сверху для предела текучести при заданном среднем размере зерна. Эта оценка составляет  $\sigma_s = 2190$  МПа для мелкодисперсных сталей с размером зерна порядка  $d \approx 1$  мкм, что соответствует реально достигнутому значениям. При оценке объемной поверхностной энергии мы брали измеренную для свободной поверхности величину  $\sigma$ . Совершенно очевидно, что она в сложных сплавах может зависеть от состава и способа обработки металла. На рис. 2 приведены эксперимен-



**Рис. 3.** Зависимость температуры плавления наночастиц золота от среднего размера  $d$ . Точки – эксперимент [3], расчет – согласно [4].

тальные данные [5] и аппроксимация, полученная из предположения, что  $W_s = W_1$ ,  $\sigma \approx 0.5$  Дж/м<sup>2</sup>.

Таким образом, мы установили, что коэффициент поверхностного натяжения кристаллитов с учетом взаимодействия с межзеренной границей позволяет получить адекватные оценки значения предела текучести для конкретных сплавов. Необходимо оценить пределы применимости предложенной модели. Учтем зависимость коэффициента поверхностного натяжения  $\sigma$  от размера кристаллитов. Для оценки мы используем значение  $\sigma$ , вычисленное по уравнению Гиббса, решение в аналитическом виде приведено в [4]. Модельную зависимость температуры плавления от размера частиц, полученную нами для золота, иллюстрирует рис. 3. Из него следует, что точное решение хорошо описывает экспериментальные данные. Температура плавления, а вместе с ней и

коэффициент поверхностного натяжения убывают с уменьшением  $d$  в нанометровом диапазоне. Возвращаясь к зависимости рис. 1, можно предположить, что наибольшие для наноматериалов значения предела текучести связаны с быстрым уменьшением  $\sigma$ , которое компенсирует рост удельной внутренней поверхности при измельчении структуры материала.

Таким образом, гипотеза о том, что энергия поверхностного натяжения может играть ключевую роль при пластическом деформировании поликристаллических материалов, подтверждается сопоставлением с экспериментальными данными. Имеющиеся экспериментальные данные о зависимости мезо процессов пластического течения от радиуса кривизны наноструктурных элементов [6] подтверждают эту точку зрения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 15–19–00091).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ovid'ko I.A., Skiba N.V.* Enhanced Dislocation Emission from Grain Boundaries in Nanocrystalline Materials // *Scr. Materialia*. 2012. V. 67. № 1. P. 13–16.
2. *Панин В.Е.* Основы физической мезомеханики // *Физ. мезомеханика*. 1998. Т. 1. № 1. С. 5–22.
3. *Buffat Ph., Borel J.-P.* Size Effect on the Melting Temperature of Gold Particles // *Phys. Rev. A*. 1976. V. 13. № 6. P. 2287–2298.
4. *Рехвиашвили С.Ш., Киштикova Е.В.* // *Письма в ЖТФ*. 2006. Т. 32. № 10. С. 50–55.
5. *Morrison W.B., Leslie W.C.* The Yield Stress-Grain Size Relation in Iron Substitutional Alloys // *Metallurg. and Materials Trans. B*. 1973. V. 4. № 1. P. 379–381.
6. *Панин В.Е., Панин А.В., Елсукова Т.Ф., Попкова Ю.Ф.* Фундаментальная роль кривизны кристаллической структуры в пластичности и прочности твердых тел // *Физ. мезомеханика*. 2014. Т. 17. № 6. С. 7–18.