

УДК 538.91

ПРЕДЕЛ ТЕКУЧЕСТИ КОМПОЗИТОВ “МЕТАЛЛ–ГРАФЕН” С ОДНОРОДНОЙ И БИМОДАЛЬНОЙ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРОЙ

© 2020 г. С. В. Бобылев^{a,b,*}, М. Ю. Гуткин^{a,b,c,**}, А. Г. Шейнерман^{a,b,d,***}

^a Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

^b Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

^c Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

^d Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: bobylev.s@gmail.com

**e-mail: m.y.gutkin@gmail.com

***e-mail: asheinerman@gmail.com

Поступила в редакцию 20.08.2019 г.

После доработки 30.08.2019 г.

Принята к публикации 18.09.2019 г.

Предложены теоретические модели, описывающие начальную стадию пластической деформации в композитах вида “металл–графен” с однородной ультрамелкозернистой металлической матрицей, а также с бимодальным распределением зерен по размеру. В рамках моделей учитываются как дислокационные механизмы пластичности, так и процессы структурных трансформаций границ зерен, связанные с зернограничным проскальзыванием. В результате расчетов получены зависимости предела текучести от размеров зерен матрицы и объемной доли графена. Модели позволяют найти оптимальное содержание графена для достижения максимальной прочности материалов.

Ключевые слова: композиты, графен, предел текучести, границы зерен

DOI: 10.31857/S0572329920010079

1. Введение. Благодаря своим превосходным механическим свойствам однофазные, но структурно неоднородные наноструктурированные материалы в последние годы привлекают огромное внимание (см., например, обзор [1]). Среди таких материалов можно выделить металлы и сплавы с бимодальным распределением зерен по размерам [2, 3], градиентные наноструктуры [4, 5], объемные металлы и сплавы с наноразмерными двойниками [2, 6, 7], а также металлы, содержащие нанозерна, расположенные внутри крупных зерен [8]. В частности, эксперименты [2, 3, 9] и моделирование [9, 10] механического поведения металлов и сплавов с бимодальным распределением зерен по размерам продемонстрировали сочетание высокой прочности с хорошей пластичностью, недостижимой для структурно однородных наноструктурированных твердых тел. В таких бимодальных материалах твердые нанокристаллические (НК) или ультрамелкозернистые (УМЗ) области обеспечивают сверхвысокую прочность, в то время как крупные зерна ответственны за достаточно высокое деформационное упрочнение и, как следствие, хорошую пластичность. Кроме того, эксперименты [6] и моделирование [11] продемонстрировали возможность достижения очень высокой прочности в купе с хорошей пластичностью за счет сочетания бимодального распределения зе-

рен по размерам и образования ростовых двойников в крупных зернах аустенитных сталей.

Одновременно с достижениями по улучшению свойств однофазных материалов значительный прогресс в последнее время был достигнут в производстве металлических материалов, упрочненных графеновыми пластинами [12, 13] или нанолентами [14] и демонстрирующих не только высокую прочность, но и хорошую пластичность. Возможность одновременного улучшения прочности и пластичности в композитах, упрочненных графеном, объяснялась [13] захватом дислокаций графеновыми пластинами в процессе пластической деформации. Благодаря большой суммарной площади своей поверхности графеновые пластины способны захватывать большое количество дислокаций, создавая тем самым высокие внутренние напряжения, которые увеличивают деформационное упрочнение и улучшают пластичность.

Последнее было подтверждено теоретически в работе [15], в которой была предложена модель, позволяющая рассчитывать кривые “напряжение–деформация” в композитах “металл–графен” с бимодальной структурой. Однако методика моделирования, предложенная в [15], учитывала только действие дислокационных механизмов пластичности. В то же время в композитах “металл–графен” зачастую наблюдается зернограничное проскальзывание. Так, в работе [16] зернограничное проскальзывание было идентифицировано как доминирующий механизм деформации в композите на базе магниевого сплава AZ61 с добавлением пластин графена. При этом размер зерна сплава после добавления графена составлял ~4 мкм. Причина активации зернограничного проскальзывания в столь крупнозернистом материале, по-видимому, связана с относительно низкой прочностью графена на сдвиг в направлении, параллельном атомным слоям, а также в отдельных случаях с плохой адгезией между графеном и матрицей. Это подтверждается работами по моделированию прочности графена на сдвиг (например, [16]) и прочности границ раздела между графеном и различными материалами (см., например, [17]). Типичные значения критических сдвиговых напряжений для проскальзывания между монослоями графена или между графеном и матрицей находятся в диапазоне 100–200 МПа. При достаточно малом размере зерна НК/УМЗ матрицы эти напряжения могут быть ниже критического напряжения для активации внутризеренной пластической деформации. Следовательно, в этом случае зернограничное скольжение по ГЗ, содержащим графен, становится предпочтительнее обычной дислокационной пластичности.

В настоящей работе предлагается теоретическая модель, позволяющая вычислить предел текучести композитов “металл–графен” как с однородной (состоящей из одинаковых по размеру зерен), так и с бимодальной зеренной структурой металлической матрицы с учетом зернограничного проскальзывания.

2. Предел текучести композитов “металл–графен” с ультрамелкозернистой металлической матрицей. Рассмотрим деформируемый композитный материал, состоящий из УМЗ металлической матрицы и включений в виде графеновых пластин, находящийся под действием одноосной растягивающей нагрузки σ (рис. 1а). Предположим, что графеновые пластины преимущественно расположены по границам зерен (ГЗ) металлической матрицы (показаны серыми линиями вдоль ГЗ на рис. 1), а их средний размер значительно меньше характерной длины ГЗ. Для определенности в дальнейшем мы представим графеновые пластины в форме дисков с диаметром L и толщиной H . Будем считать, что пластическая деформация в композите “металл–графен” может реализовываться с помощью двух механизмов: 1) испускание решеточных дислокаций из ГЗ, их скольжение через зерно и последующее поглощение соседними ГЗ и 2) зернограничное скольжение, реализующееся путем проскальзывания монослоев графеновых пластин, расположенных в ГЗ, и последующего скольжения по областям ГЗ, свободным от графена.

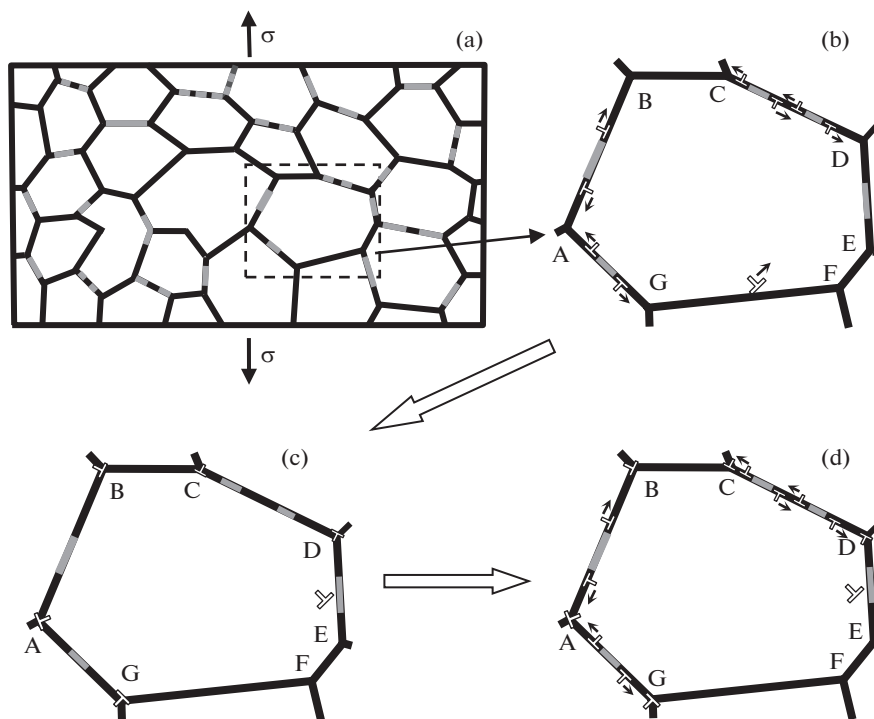


Рис. 1

Рассмотрим эти механизмы более подробно. Для этого возьмем фрагмент композитного образца, содержащий зерно и расположенные по его границам графеновые пластины (рис. 1b). Пусть под действием сдвигового напряжения, связанного с растягивающей нагрузкой σ , происходит проскальзывание между соседними монослоями графеновых пластин в плоскостях, совпадающих с плоскостями соответствующих ГЗ (рис. 1b). В результате проскальзывания монослоев графеновых пластин на краях пластин образуются диполи некристаллографических краевых дислокаций со сколь угодно малыми векторами Бюргера, равными по величине скачку перемещений проскальзывающих монослоев графена (рис. 2, 1 – граница зерна, 2 – графеновая пластина). При этом процесс генерации дислокаций может повторяться многократно (рис. 2b, 2c) Будем считать, что под действием сдвигового напряжения образующиеся дислокации в ГЗ АВ, CD и AG скользят к ближайшим тройным стыкам или ближайшим дислокациям противоположного знака, образующимся в результате проскальзывания по соседним графеновым пластинам, расположенным в той же ГЗ (рис. 1b и 2). В результате дислокации противоположного знака аннигилируют, а дислокации, скользящие к тройным стыкам, сливаются в этих стыках с дислокациями, приходящими в эти стыки из соседних ГЗ (рис. 1c). Затем указанный процесс проскальзывания повторяется (рис. 1d), и векторы Бюргера дислокаций в тройных стыках растут. При этом высокие напряжения, создаваемые дислокациями в тройных стыках, частично снимаются за счет испускания части дислокаций из тройных стыков внутрь зерен и делокализации таких дислокаций, то есть их диффузионного расползания по ГЗ.

Для расчета предела текучести композитов “металл–графен” рассмотрим самое начало этого процесса, при котором первые дислокационные диполи только зарождаются

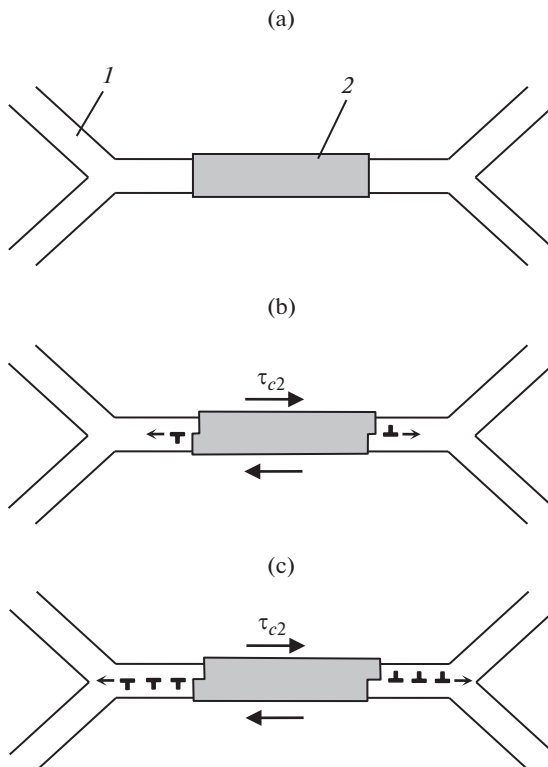


Рис. 2

ся на краях графеновых пластин. Пренебрегая слабым притяжением между дислокациями диполей с малыми величинами векторов Бюргера, запишем условие начала проскальзывания по ГЗ в виде: $\tau > \tau_{c2}$, где τ_{c2} – критическое сдвиговое напряжение для проскальзывания монослоев графита ($\tau_{c2} = 140$ МПа [16]).

Будем также считать, что наряду с зернограничным скольжением в рассматриваемом зерне происходит внутризеренная пластическая деформация за счет испускания решеточной дислокации из ГЗ FG к ГЗ DE (рис. 1b–1d). При этом процесс испускания дислокаций из ГЗ также реализуется при превышении растягивающей нагрузки некоторого критического напряжения.

Для удобства будем сравнивать композиты “металл–графен” с аналогичными металлическими образцами с такими же размерами больших и малых зерен. Другими словами, мы не будем рассматривать возможное уменьшение размера зерна, часто возникающее в результате добавления графена. Тогда можно выделить следующие механизмы, ответственные за увеличение предела текучести, связанное с графеновыми пластинами (см. [12, 13]): 1) передача нагрузки от матрицы к графеновым пластинам; 2) упрочнение из-за несоответствия коэффициентов теплового расширения металлической матрицы и графена, возникающее в процессе охлаждения образца при его синтезе; 3) упрочнение по механизму Орована [18].

Следуя [15], будем считать, что влияние первых двух механизмов на предел текучести композита “металл–графен” мало, и основной вклад в увеличение предела текучести вносит упрочнение по механизму Орована. Будем предполагать, что графен при-

существует в значительной доле ГЗ, так что пластическая деформация в УМЗ-фазе осуществляется в основном за счет движения дислокаций между ГЗ, содержащими графеновые пластины. Это означает, что графен в УМЗ-фазе должен влиять на движение решеточных дислокаций путем закрепления дислокационных сегментов, испущенных из ГЗ. Для случая упругоизотропного материала с модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν напряжение σ_{em}^{GB} , необходимое для освобождения дислокационного сегмента, закрепленного на препятствиях, лежащих на расстоянии l друг от друга, имеет вид [18]

$$\sigma_{em}^{GB} = \frac{Mgb}{4\pi(1-\nu)} \left\{ \left[2 - \nu(3 - 4\cos^2\gamma_0) \ln \frac{l}{b} - 2 + \nu \right] \right\} \quad (2.1)$$

где M – фактор Тейлора, равный 3.06 для гранецентрированных кубических (ГЦК) кристаллов [19], а γ_0 – угол между вектором Бюргера прямолинейной дислокации и ее линией. (Для металлов с ГЦК кристаллической решеткой $\gamma_0 = \pi/3$, так как для них типичны 60° решеточные дислокации.) Будем предполагать, что критическое напряжение σ_{c1} для начала внутризеренной пластической деформации увеличивается за счет наличия графена на величину σ_{em}^{GB} , а l играет роль расстояния между ближайшими точками соседних графеновых пластин, лежащих в одной ГЗ. Выражение для параметра l имеет вид [15]

$$l = \frac{(\pi^2 - 8f_{GB})L}{4\pi f_{GB}} \quad (2.2)$$

где f_{GB} – доля площади ГЗ в УМЗ-фазе, занятая графеном. Величина f_{GB} связана с объемной долей f_V графена в композите соотношением $f_{GB} = f_V d / (3H)$, где d – размер зерна.

Обозначим критическое напряжение для начала внутризеренной пластической деформации в отсутствие графена как σ_{c0} . Будем полагать, что напряжение σ_{c0} подчиняется соотношению Холла–Петча (см., например, [20]) $\sigma_{c0} = \sigma_0 + k_{HP}d^{-1/2}$, где σ_0 и k_{HP} – параметры материала, не зависящие от размера зерна d . Тогда критическое напряжение σ_{c1} для начала внутризеренной деформации в композитах “металл–графен” представимо в виде $\sigma_{c1} = \sigma_{c0} + \sigma_{em}^{GB}$.

Пусть усредненное критическое значение σ_{c2} приложенного растягивающего напряжения σ для начала зернограничного скольжения в ГЗ, содержащих графеновые пластины, связано с критическим сдвиговым напряжением τ_{c2} соотношением $\sigma_{c2} = M_1\tau_{c2}$, где M_1 – геометрический фактор. Будем считать, что если критическое напряжение σ_{c1} для испускания решеточных дислокаций из ГЗ меньше критического напряжения σ_{c2} активации проскальзывания по монослоям графеновых пластин ($\sigma_{c1} < \sigma_{c2}$), то пластическая деформация в композите происходит путем движения решеточных дислокаций от одной ГЗ к другой. Если $\sigma_{c1} > \sigma_{c2}$, то в ГЗ, содержащих графеновые пластины, происходит зернограничное скольжение, а ГЗ без графена инициируют деформацию, связанную с испусканием решеточных дислокаций. Таким образом, критическое напряжение σ_c для начала пластической деформации в ГЗ определяется соотношениями: $\sigma_c = \sigma_{c1}$ для ГЗ без графеновых пластин, и $\sigma_c = \min(\sigma_{c1}, \sigma_{c2})$ для ГЗ, содержащих одну или несколько графеновых пластин.

Следуя [21], будем рассчитывать предел текучести композита как среднее значение критического напряжения σ_c . Это дает:

$$\sigma_y^{ufg} = f_{gr} \min(\sigma_{c1}, \sigma_{c2}) + (1 - f_{gr})\sigma_{c1} \quad (2.3)$$

где f_{gr} – доля ГЗ, содержащих графен. Поскольку характер распределения графена по ГЗ зависит от технологии синтеза композитов и может быть различным, можно считать f_{gr} случайной величиной, подчиняющейся некоторому закону распределения. Более удобно, однако, в качестве случайной величины использовать долю площади (обозначим ее s) случайной ГЗ, занятую графеном. Предположим, что величина s описывается бета-распределением, описывающим распределение случайной величины в интервале значений от 0 до 1. Тогда доля f_{gr} выражается через s следующей формулой:

$$f_{gr} = 1 - \int_0^{f_s} \rho(s)ds \quad (2.4)$$

где $\rho(s) = s^{\alpha-1}(1-s)^{\beta-1}/B(\alpha, \beta)$ – плотность вероятности величины s , описываемая бета-распределением, $B(\alpha, \beta)$ – бета-функция, α и β – параметры бета-распределения, f_s – отношение площади одной графеновой пластины к площади ГЗ. Мы считаем, что границы с $s < f_s$ не содержат графена, то есть второе слагаемое в формуле (2.4) задает долю ГЗ, свободных от графена. Если предположить модельную кубическую форму зерна, то величину f_s можно записать в виде $f_s = 3\pi L^2/(4d^2)$.

В нашем случае среднее значение доли s площади ГЗ, занятой графеном, известно и равно доле $f_{GB} = f_V d_{nc}/(3H)$ площади всех ГЗ, занятых графеном. В свою очередь, для бета-распределения математическое ожидание случайной величины равно $\alpha/(\alpha + \beta)$. Тогда из условия $\alpha/(\alpha + \beta) = f_{GB}$ получаем:

$$\beta = \alpha(1 - f_{GB})/f_{GB} \quad (2.5)$$

Следовательно, характер распределения можно задавать одним параметром α .

Таким образом, формулы (2.1)–(2.5) определяют предел текучести композитов “металл–графен”, который учитывает действие не только дислокационных механизмов пластичности, но и возможность протекания зернограничного скольжения по ГЗ, содержащим графеновые пластины. С помощью этих формул рассчитаем предел текучести композита “Ni–графен”, характеризующегося следующими значениями параметров: $G = 76$ ГПа, $\nu = 0.31$, $\sigma_0 = 300$ МПа, $k_{HP} = 0.215$ МПа \cdot м^{1/2}, $b = 0.25$ нм. Положим также $M_1 = M$, $L = 100$ нм и $\alpha = 3$. На рис. 3 приведены зависимости предела текучести σ_y^{ufg} , выраженного в МПа, от размера зерна d , выраженного в мкм, для различных фиксированных значений доли f_{gr} площади ГЗ, занятой графеновыми пластинами (рис. 3а, 3б) или различных фиксированных значений объемной доли f_V графена (рис. 3с, 3д). Для сравнения на рис. 3 также приведены зависимости критических напряжений σ_{c1} и σ_{c0} (для начала внутризеренного дислокационного скольжения в композитах “Ni–графен” и в чистом никеле соответственно) от размера зерна d . Как видно на рис. 3, предел текучести σ_y^{ufg} композита уменьшается с увеличением размера зерна, как и следовало ожидать. При этом сравнение значений σ_y^{ufg} и σ_{c1} показывает, что зернограничное скольжение может существенно уменьшать предел текучести, и отрицательный вклад зернограничного скольжения в предел текучести растет с увеличением зернограничной (f_{gr}) или объемной (f_V) доли графена.

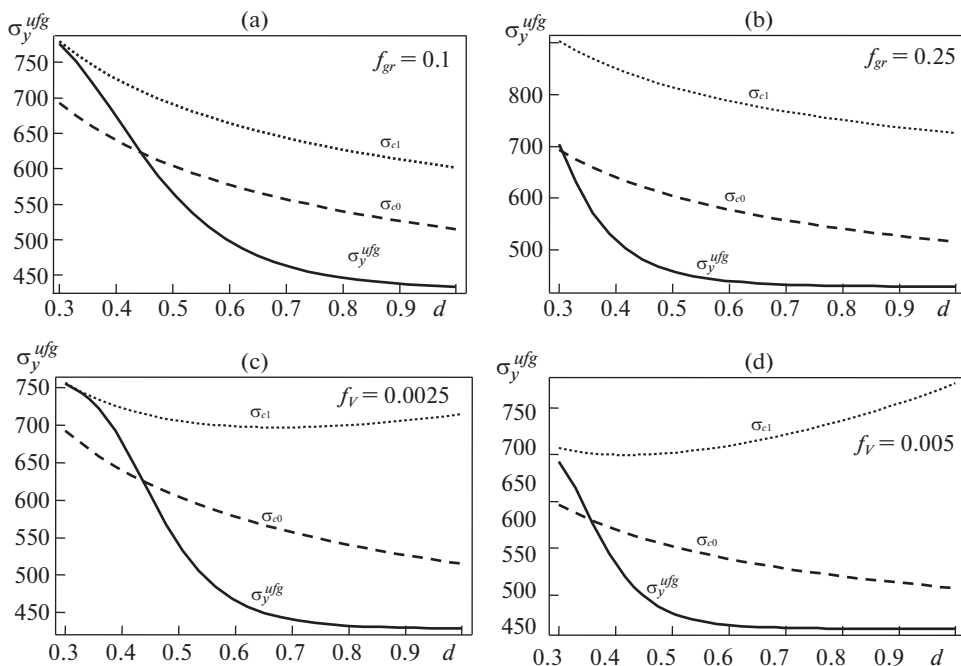


Рис. 3

Зависимости предела текучести $\sigma_y^{u/g}$ (в МПа) от доли f_{gr} площади ГЗ, занятой графеном, представлены на рис. 4 для двух различных значений размера зерна $d = 300$ нм и 700 нм. Как следует из рис. 4, для каждого размера зерна существует некоторое значение f_{gr} , при котором предел текучести максимален. Иными словами, предел текучести не растет монотонно с ростом увеличением доли графена, как можно было бы ожидать при отсутствии пор для случая внутризеренной пластичности. Причина этого состоит в том, что хотя увеличение доли графена и затрудняет испускание дислокаций из ГЗ внутрь зерен, оно усиливает отрицательный вклад межзеренного скольжения в предел текучести. Как следствие, наличие максимумов на кривых $\sigma_y^{u/g}(f_{gr})$ является следствием конкуренции двух механизмов деформации: внутризеренного дислокационного скольжения и зернограничного скольжения.

Таким образом, проведенный анализ показывает, что зернограничное скольжение по пластинам графена может начинаться при реальных напряжениях течения композитов “УМЗ Ni–графен” и уменьшать их предел текучести. Для фиксированных значений размера зерна существует оптимальное значение зернограничной (f_{gr}) или объемной (f_V) доли графена, при котором предел текучести композита “УМЗ Ni–графен” максимален.

3. Предел текучести композитов “металл–графен” с бимодальной металлической матрицей. Рассмотрим теперь поликристаллический образец с бимодальным распределением размеров зерен, то есть деформируемое твердое тело, состоящее из относительно больших зерен с размером d_{cg} , окруженных УМЗ-матрицей с размером зерна d_{ufg} (рис. 5а). Предположим, что в больших зернах, где доля ГЗ мала, графен в основном лежит в теле зерна, тогда как в УМЗ-фазе, где доля ГЗ велика, графен, как и раньше, залегает

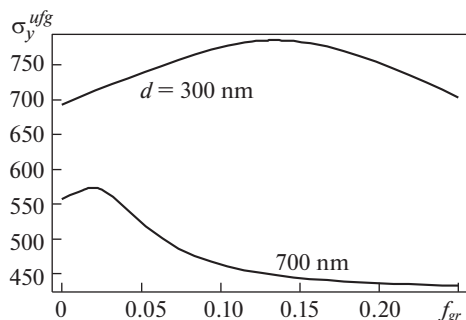


Рис. 4

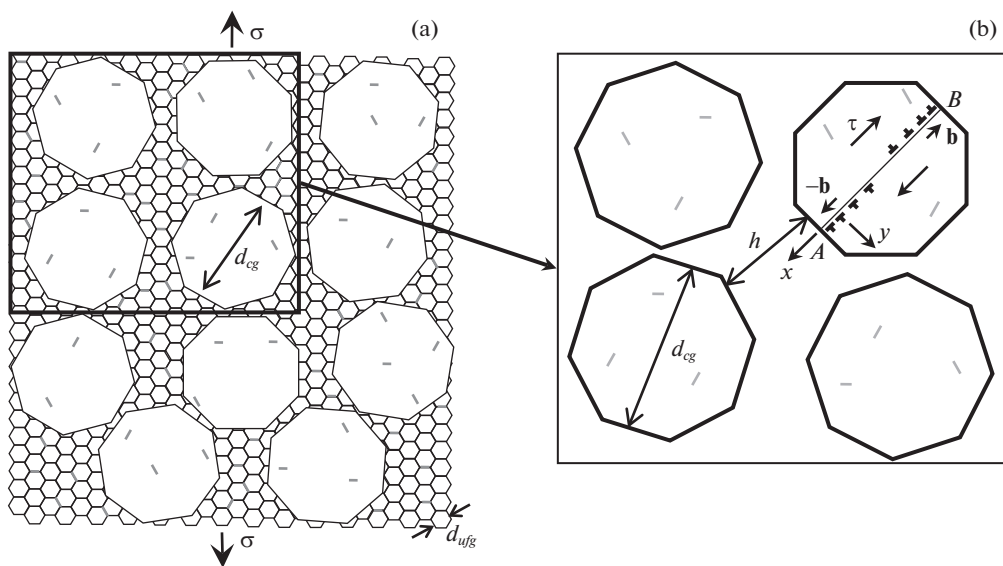


Рис. 5

преимущественно по ГЗ (графеновые пластины схематично показаны серыми линиями на рис. 5а).

Пусть образец находится под действием одноосного растягивающего напряжения σ , которое активирует источники дислокаций типа Франка–Рида в больших зернах, что в результате приводит к созданию двойных скоплений решеточных краевых дислокаций (рис. 5b). Двойное скопление дислокаций является источником сильных сдвиговых напряжений в УМЗ матрице в окрестности точек А и В на границах зерен (см. рис. 5b). Если суммарное сдвиговое напряжение, создаваемое внешней нагрузкой и двойным скоплением, достаточно велико, то пластическая деформация способна передаваться из одного большого зерна через УМЗ-матрицу в соседнее большее зерно, обеспечивая макроскопическое пластическое течение в рассматриваемом образце.

В работе [15] ранее было получено выражение для макроскопического предела текучести σ_y^{bm} композита “металл–графен” с бимодальным распределением размеров

зерен. Величина σ_y^{bm} рассчитывалась в предположении, что перенос пластической деформации осуществляется через УМЗ зерна посредством внутризеренного скольжения решеточных дислокаций вблизи плоскости, в которой лежит двойное скопление и соответственно действуют максимальные сдвиговые напряжения ($y = 0$ в системе координат (x, y) , показанной на рис. 5b). Выражение для σ_y^{bm} имеет вид [15]

$$\sigma_y^{bm} = \sigma_0 + C(\sigma_y^{ufg} - \sigma_0) + (1 - C)\sigma_{Or} \quad (3.1)$$

где

$$C = \frac{d_{cg}}{h} \int_{h_0/d_{cg}}^{(h+h_0)/d_{cg}} \frac{\sqrt{\tilde{x}(\tilde{x} + 1)}}{\delta(\tilde{x} + 1/2) + (1 - \delta)\sqrt{\tilde{x}(\tilde{x} + 1)}} d\tilde{x} \quad (3.2)$$

В формулах (3.1) и (3.2) используются следующие обозначения: σ_y^{ufg} – предел текучести УМЗ-матрицы в отсутствие больших зерен, σ_{Or} – дополнительное напряжение, связанное с огибанием движущимися дислокациями графеновых пластин в больших зернах по механизму Орована, h – среднее расстояние между большими зернами (см. рис. 5b), h_0 – расстояние между двумя головными дислокациями в скоплении в большом зерне, $\tilde{x} = x/d_{cg}$, δ – геометрический фактор порядка единицы ($\delta < 1$). Параметр h связан с объемной долей УМЗ-фазы f_{ufg} и размером больших зерен d_{cg} соотношением [15]:

$$1 - f_{ufg} = d_{cg}^3 / (\delta_1 h + d_{cg})^3 \quad (3.3)$$

где δ_1 – геометрический фактор ($\delta_1 < 1$). Параметр h_0 в свою очередь может быть выражен [15] через пределы текучести (σ_y^{ufg} и σ_y^{cg} соответственно) УМЗ-фазы и крупнозернистой фазы (без графена) как

$$\frac{h_0}{d_{cg}} = \frac{1}{2A(A + \sqrt{A^2 - 1}) - 2} \quad (3.4)$$

где

$$A = \frac{\sigma_y^{ufg} - \sigma_0}{\delta(\sigma_y^{cg} - \sigma_0)} + \frac{\delta - 1}{\delta} \quad (3.5)$$

Напряжение σ_{Or} задается выражением [22]

$$\sigma_{Or} = \frac{0.84MGb}{2\pi(1 - \nu)^{1/2}l_0} \ln \frac{l_0}{2b} \quad (3.6)$$

где l_0 – среднее расстояние между соседними графеновыми пластинами. Это расстояние выражается через объемную долю f_V графена в материале и размеры L и H пластин как [15]

$$l_0 = \pi \sqrt{\frac{LH}{8f_V}} - \frac{4L}{\pi^2} \quad (3.7)$$

Модель, развитая авторами [15], учитывает только дислокационные механизмы пластичности (то есть испускание дислокаций из ГЗ) и стандартное упрочнение, описываемое соотношением Холла–Петча, а также эффекты, связанные с взаимодействием решеточных дислокаций с пластинами графена (огибание и накопление дислокаций вблизи пластин). В настоящей работе мы учтем также влияние зерногранич-

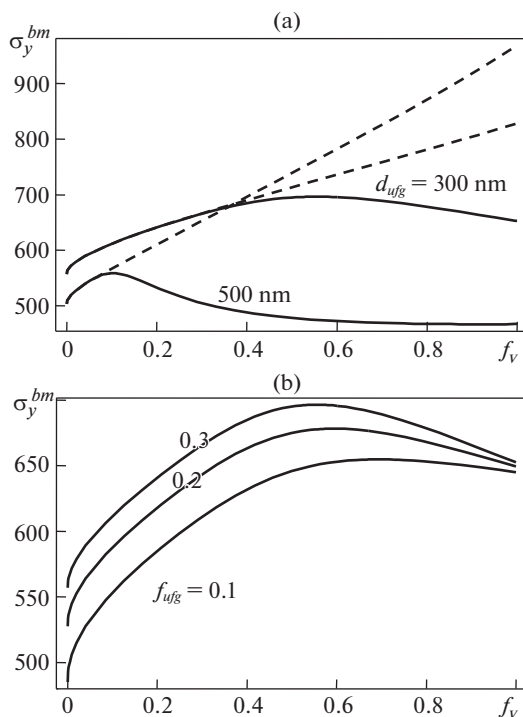


Рис. 6

ного скольжения на предел текучести композитов “бимодальный металл–графен”. Поскольку мы изначально предполагаем, что графен залегает в границах зерен в УМЗ-фазе, то зернограничное скольжение оказывает влияние только на предел текучести УМЗ-фазы. Таким образом, для расчета предела текучести σ_y^{bm} , учитывающего зернограничное скольжение, достаточно подставить найденное в предыдущем параграфе напряжение σ_y^{ufg} в формулы (3.1)–(3.7).

Выполним расчет предела текучести σ_y^{bm} на примере композита “никель–графен”. При этом используем те же значения параметров, что и в предыдущем параграфе, а также значение $\sigma_{cg} = 400$ МПа. На рис. 6а приведены зависимости $\sigma_y^{bm}(f_V)$, рассчитанные для графеновых пластин с размерами $L = 100$ нм, $H = 3.5$ нм, доли УМЗ-фазы $f_{ufg} = 0.3$ и двух разных размеров зерна $d_{ufg} = 300$ нм и 500 нм (значения величин σ_y^{bm} и f_V даны, соответственно, в МПа и объемных процентах). Также на этом рисунке для сравнения штриховыми линиями показаны аналогичные зависимости для такого же композита без учета зернограничного скольжения. На рис. 6 хорошо видно, что учет зернограничного скольжения приводит к достаточно сильному уменьшению предела текучести. Более того, увеличение концентрации графена выше определенного значения начинает понижать предел текучести. Подобное поведение достаточно типично для композитов с наполнителем в виде графена. Однако причины падения прочности с ростом концентрации графена могут быть связаны не только с активацией зернограничного скольжения, но и с зарождением и ростом трещин и пор вокруг графеновых

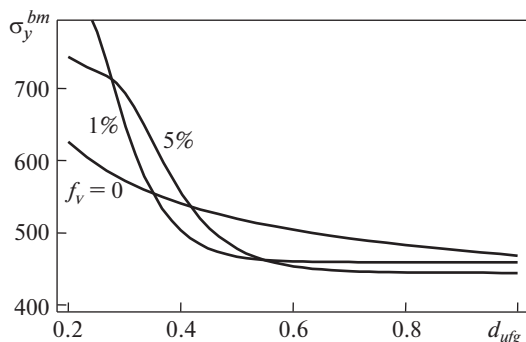


Рис. 7

пластин. Это затрудняет сравнение результатов расчетов с экспериментом. Поэтому мы рассмотрим только качественный характер зависимостей $\sigma_y^{bm}(f_V)$.

Рисунок 6b демонстрирует серию зависимостей $\sigma_y^{bm}(f_V)$, построенных для разных значений f_{ufg} и значений $L = 100$ нм, $H = 3.5$ нм и $d_{ufg} = 300$ нм (значения величин σ_y^{bm} и f_V даны, соответственно, в МПа и объемных процентах). Эта серия кривых показывает, что предел текучести возрастает с увеличением доли УМЗ-фазы.

На рис. 7 построены зависимости $\sigma_y^{bm}(d_{ufg})$ предела текучести бимодального композита “никель—графен” от размера зерна УМЗ-фазы для разных значений концентрации графена, тех же размеров графеновых пластин, что и предыдущий рисунок, и доли УМЗ-фазы $f_{ufg} = 0.3$ (значения напряжения даны в МПа, а размера зерна в мкм). Из рис. 7 видно, что зависимости $\sigma_y(d_{nc})$ имеют весьма сложный характер. В разных диапазонах размеров зерен предел текучести ведет себя по-разному в зависимости от концентрации графена. В области малых размеров зерна композиты с большим содержанием графена имеют более высокий предел текучести, но для больших размеров зерен, наоборот, композиты с меньшим содержанием графена обладают более высоким пределом текучести. То есть, для заданного размера зерна можно определить оптимальную концентрацию графена, при которой достигается максимальный предел текучести материала.

Таким образом, проведенный анализ показывает, что в бимодальных композитах металл-графен с высоким напряжением течения УМЗ-фазы металлической матрицы зернограничное скольжение может уменьшать предел текучести, снижая тем самым твердость композитов. При этом уменьшение предела текучести композитов, связанное с зернограничным проскальзыванием, проявляется при превышении критического значения объемной доли графена.

4. Заключение. Таким образом, в настоящей работе предложена теоретическая модель, которая позволяет вычислить предел текучести композитов “металл—графен” с металлической матрицей с однородной ультрамелкозернистой и бимодальной зерновой структурой. В рамках модели предполагалось, что графен преимущественно залегают по границам зерен в УМЗ-фазе, а в случае бимодальной структуры также и внутри больших зерен. Предложенная модель учитывает как дислокационные механизмы пластичности, так и зернограничное скольжение. Для случая композитов с однородной УМЗ металлической матрицей на примере композита “УМЗ Ni—графен” было

показано, что зернограничное скольжение по пластинам графена может начинаться при реальных напряжениях течения композитов “металл–графен” и уменьшать их предел текучести. Для фиксированных значений размера зерна существует оптимальное значение объемной доли графена, при котором предел текучести композита максимален.

Для случая композитов с бимодальной структурой металлической матрицы мы показали, что зернограничное скольжение также уменьшает предел текучести. При этом уменьшение предела текучести композитов, связанное с зернограничным проскальзыванием, проявляется при превышении критического значения объемной доли графена.

Предложенная модель позволяет выявить особенности зависимости предела текучести композитов “УМЗ металл–графен” и “бимодальный металл–графен” от их структурных параметров (размера зерна, объемной доли графена и УМЗ-фазы) и определить оптимальные значения таких параметров для достижения максимальной прочности материала.

Работа выполнена при поддержке проекта 18-01-00243 РФФИ (для А.Г.Ш.), проекта 18-29-19086 РФФИ (для С.В.Б.), а также заданий 16.3483.2017/ПЧ (для С.В.Б. и А.Г.Ш.) и 3.3194.2017/4.6 (для М.Ю.Г.) Министерства науки и высшего образования РФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ma E., Zhu T.* Towards strength-ductility synergy through the design of heterogeneous nanostructures in metals // *Mater. Today*. 2017. № 6. V. 20. P. 323–331.
2. *Li Y.S., Zhang Y., Tao N.R., Lu K.* Effect of thermal annealing on mechanical properties of a nanostructured copper prepared by means of dynamic plastic deformation // *Scr. Mater.* 2008. V. 59. № 4. P. 475–478.
3. *Raju K.S., Sarma V.S., Kauffmann A., Hegedus Z., Gubicza J., Peterlechner M., Freudenberger J., Wilde G.* High strength and ductile ultrafine-grained Cu-Ag alloy through bimodal grain size, dislocation density and solute distribution // *Acta Mater.* 2013. V. 61. № 1. P. 228–238.
4. *Fang T.H., Li W.L., Tao N.R., Lu K.* Revealing extraordinary intrinsic tensile plasticity in gradient nano-grained copper // *Science*. 2011. V. 331. № 6024. P. 1587–1590.
5. *Zhu L., Wen C., Gao C., Guo X., Chen Z., Lu J.* Static and dynamic mechanical behaviors of gradient-nanotwinned stainless steel with a composite structure: Experiments and modeling // *Int. J. Plasticity*. 2019. V. 114. P. 272–288.
6. *Yan F.K., Tao N.R., Archie F., Gutierrez-Urrutia I., Raabe D., Lu K.* Deformation mechanisms in an austenitic single-phase duplex microstructured steel with nanotwinned grains // *Acta Mater.* 2014. V. 81. P. 487–500.
7. *Kim J.G., Enikeev N.A., Seol J.B., Abramova M.M., Karavaeva M.V., Valiev R.Z., Park C.G., Kim H.S.* Superior strength and multiple strengthening mechanisms in nanocrystalline TWIP steel // *Sci. Rep.* 2018. V. 8. P. 11200.
8. *Wu X., Yang F., Yang M., Jiang P., Zhang X., Chen L., Wei Y., Ma E.* Nanodomained nickel unite nanocrystal strength with coarse-grain ductility // *Sci. Rep.* 2015. V. 5. P. 11728.
9. *Ramtani S., Dirras G., Bui H.Q.* A bimodal bulk ultra-fine-grained nickel: Experimental and micro-mechanical investigations // *Mech. Mater.* 2010. V. 42. № 5. P. 522–536.
10. *Magee A.C., Ladani L.* Representation of a microstructure with bimodal grain size distribution through crystal plasticity and cohesive interface modeling // *Mech. Mater.* 2015. V. 82. P. 1–12.
11. *Zhu L., Guo X., Ruan H., Lu J.* Prediction of mechanical properties in bimodal nanotwinned metals with a composite structure // *Comp. Sci. Technol.* 2016. V. 123. P. 222–231.
12. *Jiang Y., Xu R., Tan Z., Ji G., Fan G., Li Z., Xiong D.-B., Guo Q., Li Z., Zhang D.* Interface-induced strain hardening of graphene nanosheet/aluminum composites // *Carbon*. 2019. V. 146. P. 17–27.
13. *Liu X., Li J., Liu E., He C., Shi C., Zhao N.* Towards strength-ductility synergy with favorable strengthening effect through the formation of a quasi-continuous graphene nanosheets coated Ni structure in aluminum matrix composite // *Mater. Sci. Eng. A*. 2019. V. 748. P. 52–58.

14. *Yang M., Weng L., Zhu H., Fan T., Zhang D., Zhu H.* Simultaneously enhancing the strength, ductility and conductivity of copper matrix composites with graphene nanoribbons // *Carbon*. 2017. V. 118. P. 250–260.
15. *Sheinerman A.G., Gutkin M.Yu.* Model of enhanced strength and ductility of metal/graphene composites with bimodal grain size distribution // *Metall. Mater. Trans. A*. принята в печать. URL: <https://doi.org/> (дата обращения: 20.08.2019). <https://doi.org/10.1007/s11661-019-05500-w>
16. *Liu Z., Zhang S., Yang J., Liu J.Z., Yang Y., Zheng Q.* Interlayer shear strength of single crystalline graphite // *Acta Mech. Sin.* 2012. V. 28. № 4. P. 978–982.
17. *Chen S.J., Li C.Y., Wang Q., Duan W.H.* Reinforcing mechanism of graphene at atomic level: Friction, crack surface adhesion and 2D geometry // *Carbon*. 2017. V. 114. P. 557–565.
18. *Хупт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
19. *Taylor G.I.* Plastic strain in metals // *J. Inst. Metals*. 1938. V. 62. P. 307–324.
20. *Cordero Z.C., Knight B.E., Schuh C.A.* Six decades of the Hall–Petch effect – a survey of grain-size strengthening studies on pure metals // *Int. Mater. Rev.* 2016. V. 61. № 8. P. 495–512.
21. *Masumura R.A., Hazzledine P.M., Pande C.S.* Yield stress of fine grained materials // *Acta Mater.* 1998. V. 46. № 13. P. 4527–4534.
22. *Melander A.* Critical resolved shear stress of dispersion strengthened alloys // *Scand. J. Metall.* 1978. V. 7. P. 109–113.