

УДК 538.911:539.374.1

DOI: 10.17223/00213411/62/5/142

*И.Ю. ЛИТОВЧЕНКО<sup>1,2</sup>, А.Н. ТЮМЕНЦЕВ<sup>1,2</sup>*

## АТОМНЫЕ МОДЕЛИ МЕХАНИЧЕСКОГО ДВОЙНИКОВАНИЯ И <110>-ПЕРЕОРИЕНТАЦИИ В ОЦК-КРИСТАЛЛАХ

Предложены атомные модели механического двойникования и формирования полос <110>-переориентации в ОЦК-кристаллах путем ОЦК→ГЦК→ОЦК-превращений с изменением системы обратных превращений. Показано, что {112} двойники деформации формируются в процессе указанных выше превращений, когда сдвиги и направления однородной деформации обратного превращения осуществляются в кристаллографически эквивалентных направлениях, составляющих с исходным (при прямом превращении) углы 60°, а также выполняются ориентационные соотношения Курдюмова – Закса. Реализация ориентационных соотношений Нишиямы – Вассермана или изменение типа ориентационных соотношений в процессе обратного превращения приводят к переориентации кристаллической решетки микрополос вокруг направлений типа <110> на углы 60° или (60±5.23)°. Важной особенностью этих моделей является значительный вклад однородной деформации превращения мартенситного типа в величину пластической деформации двойника.

**Ключевые слова:** механизмы деформации, нанокристаллы, обратимые мартенситные превращения по альтернативным системам, механическое двойникование, переориентации кристаллической решетки.

### Введение

Механическое двойникование является одним из важных механизмов деформации нанокристаллических металлических материалов с ГЦК- и ОЦК-решетками. При уменьшении размеров кристаллитов до наномасштабного уровня движение полных дислокаций становится энергетически невыгодным, требует очень высоких напряжений для активации дислокационных источников, что приводит к подавлению пластической деформации скольжением [1]. Механизмы двойникования в нанокристаллах качественно отличны от таковых в крупнокристаллических материалах, в частности от традиционного полюсного механизма [2], поскольку для его реализации в наноразмерных зернах требуются очень высокие напряжения, превышающие теоретическую прочность кристалла. В работах [3, 4] показана реализация новых механизмов двойникования в ГЦК-нанокристаллах – движением частичных дислокаций  $a/6\langle 112 \rangle$ , испускаемых с границы, или зарождающихся в теле зерна и перекрытием растянутых дефектов упаковки.

Двойникование в нанокристаллах часто сопровождается фазовыми превращениями, нехарактерными для крупнокристаллических материалов. В процессе молекулярно-динамического исследования механизмов деформации нановолокон железа обнаружено, что при растяжении в ориентации [110] пластическое течение реализуется путем локального фазового ОЦК→ГЦК-превращения [5]. В нанокристаллах молибдена в процессе модельных экспериментов растяжением в <111>-ориентации обнаружено мартенситное ОЦК→ГЦК-превращение в метастабильную ГЦК-фазу, существующую только в процессе деформации. При разгрузке эта фаза трансформируется в исходную ОЦК-решетку [6].

Возможности обратимых фазовых превращений в процессе пластической деформации нанокристаллов в настоящее время интенсивно исследуются. В процессе молекулярно-динамического моделирования пластической деформации кристаллита меди показаны ГЦК→ОЦК→ГЦК-превращений на фронте движения частичной дислокации Шокли [7]. Формирование двойников (по плоскостям {112}) в ОЦК-решетке через последовательность прямых плюс обратных ОЦК→ГЦК→ОЦК-превращений недавно продемонстрировано в работе [8] в процессе молекулярно-динамического моделирования пластической деформации ОЦК-железа. Обнаружено, что в вершине растущего двойника происходит перестройка кристаллической решетки железа из ОЦК в ГЦК и затем снова в ОЦК. Формирование нанополос 54.7°<110>-переориентации в процессе ОЦК→ГЦК→ОЦК-превращений показано методами высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии в сплаве на основе железа [9] и в процессе *in situ* деформации в колонне просвечивающего электронного микроскопа вблизи раскрывающейся трещины в молибдене [10]. Превращения аналогичного типа обнаружены методами молекулярной динамики в процессе моде-

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала  
**«Известия высших учебных заведений. Физика»**  
осуществляется на платформе  
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU  
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>