

УДК 538.971

DOI: 10.17223/00213411/62/8/46

*К.П. ЗОЛЬНИКОВ, Д.С. КРЫЖЕВИЧ, А.В. КОРЧУГАНОВ***СТРУКТУРНЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ В ОБЛАСТИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН  
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ \***

Проведен молекулярно-динамический анализ особенностей структурных трансформаций в границах зерен (ГЗ) нанокристаллических металлов с ГЦК- и ОЦК-решетками при сдвиговых нагрузках. Объектами исследования являлись образцы никеля и ванадия, содержащие симметричные наклонные ГЗ. Сдвиговое нагружение задавалось смещением с постоянной скоростью приповерхностных атомных слоев, параллельных плоскости ГЗ. Сдвиговая нагрузка вызывала высокоскоростное движение ГЗ вдоль нормали к их плоскости. Для инициирования движения ГЗ требуется достижение высоких напряжений. Периодические граничные условия препятствовали возникновению вращений зерен. Скорость движения ГЗ определялась скоростью сдвига и зависела от угла разориентации зерен. Обнаружено, что движение ГЗ имеет скачкообразный характер и сопровождается быстрым падением внутренних напряжений. Выявлены самосогласованные структурные трансформации атомных плоскостей, посредством которых происходит высокоскоростное движение ГЗ в металле.

**Ключевые слова:** граница зерен, наноструктурные материалы, атомные механизмы, высокоскоростное движение границ зерен, молекулярная динамика.

**Введение**

Нанокристаллические металлические материалы характеризуются уникальными физико-механическими свойствами, которые обусловлены малыми размерами зерен и высокой плотностью ГЗ [1, 2]. Функциональные возможности таких материалов для использования на практике далеко не исчерпаны, что стимулирует активное изучение наноразмерных и интерфейсных процессов, определяющих особенности формирования высоких показателей прочности, твердости, износостойкости, а также атомных механизмов зарождения и развития пластичности при механическом нагружении [3, 4]. С уменьшением размера зерен до нанометрового масштаба обычные дислокационные механизмы деформации постепенно заменяются индуцированными зернограничными механизмами [5, 6]. Ввиду малых размеров структурных элементов и быстротечности процессов экспериментальное изучение поведения материалов на микроуровне сталкивается со значительными трудностями. Эти трудности могут быть преодолены в рамках численных подходов. Одним из наиболее эффективных подходов для исследования процессов на атомном уровне, анализа статических и динамических свойств нанокристаллических материалов в условиях внешнего воздействия является компьютерное моделирование [7–11]. Наиболее точно фундаментальные свойства материалов на атомном уровне могут быть описаны в рамках использования первопринципного подхода [12]. Однако ввиду громоздкости вычислений объем изучаемого образца ограничен несколькими тысячами атомов. Моделирование представительного объема материала (до миллиарда атомов) может быть проведено на основе молекулярно-динамического подхода с использованием многочастичного межатомного потенциала [13]. Применение молекулярно-динамического моделирования ведет к значительному углублению понимания особенностей деформационного поведения материалов в процессе нагружения [14–16]. Следует отметить, что для обработки огромных массивов данных моделирования постоянно совершенствуются математические алгоритмы визуализации [17] и идентификации различных дефектов структуры [18, 19], необходимых для эффективного анализа структурных трансформаций на атомном масштабе.

Любое механическое нагружение приводит к формированию сдвиговых напряжений в образце. В нанокристаллических металлах важным механизмом пластичности является навязанное сдвигом движение ГЗ. В общем случае движение ГЗ можно разложить на нормальное и тангенциальное движение относительно нормали к их плоскости. Смещения по нормали приводят к росту одного зерна за счет другого. Иногда высокоскоростное сдвиговое нагружение кристаллита может формировать вихревое движение атомов в области симметричных наклонных ГЗ [20]. Диаметры

\* Исследования проведены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 гг., направление III.23.

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>