УДК 548.4; 539.4

DOI: 10.17223/00213411/63/6/43

К.П. ЗОЛЬНИКОВ, Д.С. КРЫЖЕВИЧ, А.В. КОРЧУГАНОВ

ОСОБЕННОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В НАНОПРОВОЛОКАХ АЛЬФА-ЖЕЛЕЗА *

Изучены особенности зарождения и распространения дефектов структуры в наноразмерных образцах железа с идеальной ОЦК-решеткой при одноосном растяжении вдоль различных кристаллографических направлений. Изучение проводилось в рамках метода молекулярной динамики. Обнаружено, что механизмы зарождения пластической деформации существенно зависят от ориентации образца относительно направления нагружения. Превышение предела упругости при растяжении вдоль направления $[11\bar{2}]$ ведет к генерации двойника на одном из ребер образца. В теле двойника зарождаются дислокации. На фронте распространения двойникующих дислокаций могут формироваться локальные области с ГЦК-решеткой. Большое число двойников с высокой скоростью роста и малой толщиной формируется в кристалле при растяжении вдоль направления $[1\bar{1}0]$. В процессе нагружения сформированные двойники имеют тенденцию к трансформации в дислокации. Зарождение пластической деформации имеет выраженную дислокационную природу в случае растяжения образца вдоль направления $[111]$. В процессе нагружения численность дислокаций увеличивается лавинообразно, затем дислокации выходят на свободные поверхности, оставляя в объеме образца вакансии в местах пересечения.

Ключевые слова: нанопроволоки, анизотропия, дефекты структуры, пластическая деформация, механическое нагружение, атомные механизмы, молекулярная динамика.

Введение

Наноразмерные материалы находят широкое применение в качестве электронных и механических деталей различных устройств и приборов [1]. Высокая востребованность наноразмерных образцов на практике обусловлена их уникальными физико-механическими свойствами. Уменьшение размеров монокристалла до наноразмерного масштаба оказывает существенное влияние на его прочность и пластичность, которые определяются особенностями зарождения и эволюции дефектов структуры в материале [2, 3]. Уменьшение размера образцов приводит к росту влияния свободных поверхностей на поведение и свойства наноразмерного материала. Кроме того, наноразмерные кристаллические образцы практически не содержат дефектов структуры в объеме материала. В поликристаллических материалах размер зерна играет важную роль в пластическом поведении. Уменьшение размера зерна до нанометрового уровня ведет к переходу от пластичного к хрупкому режиму из-за уменьшения вклада от деформационного упрочнения [4–6]. Размеры монокристаллических материалов, также как и размеры зерен в поликристаллах, во многом определяют механизмы деформации и, следовательно, механические свойства монокристаллов. Локальные структурные перестройки, возникающие вследствие тепловых колебаний решетки и перераспределения напряжений, вызванных внешними воздействиями, приводят к зарождению различных дефектов структуры [7–9].

Экспериментальное изучение поведения наноразмерных кристаллов при механическом нагружении встречает трудности, связанные с малыми пространственно-временными масштабами процессов, происходящих при структурных трансформациях решетки материала. Более эффективным подходом к изучению атомных механизмов пластичности является компьютерное моделирование, которое подробно описывает динамику структурных изменений в кристаллической решетке [10–13]. Вопросы зарождения и развития дефектов структуры в рамках компьютерного моделирования наиболее подробно изучены применительно к металлическим материалам с ГЦК-решеткой [14, 15]. Динамика структурных превращений, приводящих к образованию дефектов, в ОЦК-материалах менее изучена [3]. Известно, что дислокационное скольжение и двойникование являются основными механизмами пластической деформации в ОЦК-материалах [16, 17]. Наряду с ними при высоких скоростях деформирования материал с ОЦК-структурой может вести себя как вязкая жидкость, сохраняя при этом свою кристаллическую решетку, оставаясь прочным и твер-

* Работа выполнена в рамках госзадания ИФПМ СО РАН, проект III.23.1.4.

Уважаемые читатели!

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

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