

На правах рукописи



Яшин Александр Вячеславович

**ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ И СТАДИЙ
ДЕФОРМАЦИИ НАНОВОЛОКОН РЯДА МЕТАЛЛОВ И
СПЛАВА Ni_3Al НА ОСНОВЕ ГЦК РЕШЕТКИ**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Барнаул – 2010

Работа выполнена в ГОУ ВПО

«Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор, Старостенков М.Д.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор,
Безносюк С.А.,

доктор физико-математических наук, профессор,
Дмитриев С.В.

Ведущая организация: Томский государственный архитектурно-
строительный университет, г. Томск

Защита состоится « 28 » апреля 2010 г. в 14 час. на заседании
диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном
техническом университете по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского
государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Автореферат разослан « _____ » марта 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



Романенко В.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. В науке о материалах очень важное место отводится задаче конструирования новых видов материалов с заранее заданными свойствами, которые зависят от компонент, входящих в состав, строения материала на различных уровнях, формы образца и режима эксплуатации. В связи с этим появилась новая область на стыке науки и техники – *нанотехнология*. Впервые этот термин был использован К.Танигучи в 1974 году на конференции Японского общества точного машиностроения [1]. Автор доклада предсказал переход к обработке материалов с ультравысокой точностью, а термин «нанотехнология» определил, как междисциплинарную технологию, позволяющую производить манипуляцию с объектами от 0,1 до 100 нм. В настоящее время *наноматериалами* условно принято считать материалы, свойства которых определяются элементами строения с размерами менее, чем 100 нм. Таким образом, наноматериалами называют не только наноразмерные частицы, но и материалы, созданные с их участием. Строительными блоками для наноматериалов могут быть зерна чистых металлов или сплавов и *нановолокна* [2]. Под нановолокном понимают протяженный монокристалл, в кристаллической решётке которого практически отсутствуют дефекты. Отметим, что в литературе встречается другой термин для обозначения данных объектов – *нанопроволока*, однако мы используем термин - *нановолокно*.

Свойства материалов на макро- и нано- уровнях часто отличаются [3]. Например, прочность нановолокон в десятки раз выше, чем у обычных образцов. В ряде случаев встречается явление эффекта памяти формы, которое не наблюдается на макроуровне. Механизмы структурно-энергетических превращений в различных режимах деформации определяют прочностные свойства материалов, то есть свойства твердых тел сопротивляться разрушению и необратимому изменению формы [4]. Таким образом, задача изучения механизмов структурно-энергетических превращений, происходящих в процессе высокоскоростной деформации нановолокон чистых металлов и сплавов, интересна с точки зрения развития теоретических представлений о свойствах нанообъектов и создания новых видов наноматериалов с заданными свойствами.

Известно, что структурно-энергетические превращения в процессе деформации имеют свою стадийность [5,6]. Каждая стадия отличается типом образующихся дефектов и характером взаимодействия между ними.

В последние пять лет в научной литературе отмечается рост публикаций посвященных исследованию с привлечением ЭВМ структурно-энергетических превращений в процессе высокоскоростной деформации (10^8 - 10^{10} с⁻¹) нановолокон на основе чистых металлов, таких как золото, серебро, никель, алюминий и др. Однако, мало исследованными остаются свойства нановолокон интерметаллидов, в частности Ni_3Al . Данный материал обладает положительной температурной зависимостью предела текучести. При деформации в таких сплавах может происходить сочетание структурных и сверхструктурных изменений, обуславливающих различные эффекты.

В связи с изложенным, представленное исследование, с привлечением метода молекулярной динамики, структурно-энергетических превращений в нановолокнах чистых ГЦК металлов Ni, Al и сплава Ni₃Al в процессе высокоскоростной деформации является актуальным.

Цель работы заключается в изучении методами компьютерного моделирования структурной перестройки нановолокон, подвергнутых высокоскоростной деформации.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что методом молекулярной динамики на атомном уровне исследованы основные стадии структурно-энергетических превращений, происходящих в нановолокнах Ni, Al и Ni₃Al в процессе высокоскоростной деформации растяжения, при различных температурах. Выявлены механизмы, реализующие структурно-энергетические превращения, характерные для каждой стадии. Показано, что ориентация оси растяжения нановолокна влияет на особенности структурно-энергетических превращений на второй стадии деформации: в нановолокнах с ориентацией оси растяжения $\langle 111 \rangle$ происходит рекристаллизация, в нановолокнах с ориентацией оси растяжения $\langle 110 \rangle$ наблюдается поворот участков нановолокна с образованием субструктурных блоков (чистые металлы) и антифазных доменов (сплавы). Выявлено влияние температуры на длительность первой стадии деформации, количество точечных дефектов, образующихся на первой стадии деформации, и величину предела текучести. На примере нановолокон Ni₃Al показано, что изменение скорости деформации приводит к изменению величины предела текучести и относительной деформации в конце первой стадии. Установлено, что наибольшая скорость нарушения ближнего порядка в процессе деформации нановолокон Ni₃Al наблюдается при ориентации оси растяжения вдоль направления $\langle 110 \rangle$, а наименьшая при ориентации оси растяжения вдоль направления $\langle 001 \rangle$.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы для развития теории пластической деформации и при исследовании деформации нановолокон ГЦК металлов и сплавов. Полученные результаты могут найти практическое применение при использовании материалов со сверхструктурой L1₂ в качестве наполнителей в нанотрубках или в качестве составных частей в более сложных наноматериалах. Результаты компьютерного моделирования могут быть использованы в качестве демонстрационного материала для студентов материаловедческих специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В процессе деформации растяжения нановолокон ГЦК металлов выявлены четыре стадии структурно-энергетических превращений: квазиупругая, пластическая, течения и разрушения. На каждой стадии деформации наблюдаются характерные для нее механизмы, реализующие структурно-энергетические превращения.
2. Ориентация оси растяжения и форма нановолокна оказывают влияние на особенности структурно-энергетических превращений в нановолокнах ГЦК металлов: при ориентации оси растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ субструктурные блоки (чистые металлы) и антифазные домены (сплавы) образуются поворотом участков нановолокна, при ориентации оси растяжения в направлении $\langle 111 \rangle$ наблюдается повторяющееся восстановление кристаллической структуры нановолокна.
3. Температура эксперимента влияет на характер структурно-энергетических превращений на всех этапах деформации. Величина температуры влияет на длительность первой стадии деформации, количество точечных дефектов на первой стадии деформации и величину предела текучести.
4. С изменением скорости деформации происходит изменение величины предела текучести и относительной деформации в конце первой стадии деформации.
5. В зависимости от ориентации оси растяжения нановолокон Ni_3Al меняется величина параметра ближнего порядка на первой координационной сфере. При ориентации оси растяжения $\langle 001 \rangle$ данная величина в процессе деформации наименьшая, а при ориентации $\langle 110 \rangle$ - наибольшая.

Апробация работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях и симпозиумах: всероссийских научно-технических конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых «Проблемы социального и научно-технического развития в современном мире» (г.Рубцовск, 2007, 2008), XIV и XV международных научно-практических конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии» (г.Томск, 2008, 2009), XVIII петербургских чтениях по проблемам прочности и роста кристаллов (г.С-Петербург, 2008), III (XXXV) международной научно-практической конференции «Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей» (г.Кемерово, 2008), XLVII международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (г.Н.Новгород, 2008), открытой школе-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы – 2008» (г.Уфа, 2008), V всероссийской конференции «Механика микронеоднородных материалов и разрушение» (г.Екатеринбург, 2008), V международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов» (г.Черноголовка, 2008), международных симпозиумах «Упорядочение в минералах и сплавах» - OMA-11 и OMA-12 (г.Ростов-на-Дону, п.Лoo, 2008, 2009), European Materials Research Society (E-MRS) Fall Meeting and Exhibit (г.Варшава, Польша, 2008), 9-й всероссийской научной конференции «Краевые задачи и математическое моделирование» (г.Новокузнецк, 2008), международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые -

науке, технологиям и профессиональному образованию» (г.Москва, 2008), I-ой международной Казахстано-Российско-Японской конференции «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов» (г.Усть-Каменогорск, Казахстан, 2008), I региональной научно-практической конференции «Перспективы развития nanoиндустрии Алтая. Анализ состояния патентно-лицензионной деятельности нанотехнологической сети региона» (г.Бийск, 2009), международном симпозиуме «Перспективные материалы и технологии» (г.Витебск, Беларусь, 2009), II всероссийской конференции с Интернет-участием «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к nanoиндустрии» (г.Ижевск, 2009), VI международной конференции «Математическое моделирование в образовании, науке и производстве» (г.Тирасполь, Приднестровье, 2009), 12th International Conference on Fracture – ICF (г.Оттава и г.Онтарио, Канада, 2009), III международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» - DFMN-09 (г.Москва, 2009), всероссийской конференции с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы. Создание, структура, свойства» (г.Томск, 2009), XVII международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (г.Самара, 2009), VII международной Российско-Казахстано-Японской научной конференции «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов» (г.Волгоград, 2009).

Публикации. Результаты работы опубликованы в 32 статьях в российских и зарубежных изданиях. Число публикаций в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, составляет 2. Яшин А.В. является соавтором зарегистрированного программного продукта, на котором выполнялись расчеты.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 195 наименований. Работа изложена на 221 странице машинописного текста, содержит 11 таблиц и 186 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание диссертации по главам.

Первая глава диссертации посвящена литературному обзору современных теоретических и экспериментальных сведений о наноматериалах. В начале главы описаны виды наноматериалов, применяемых в промышленности, способы их промышленного и лабораторного производства, приведены примеры, описывающие отрицательное влияние наночастиц на живые организмы,

представлены экспериментальные способы исследования свойств наноматериалов.

Во второй части главы представлен обзор известных методов компьютерного моделирования, которые применяются при исследовании свойств материалов. Перечислены потенциалы межатомного взаимодействия, применяемые в методе молекулярной динамики. Отдельно приводятся результаты, полученные различными авторами при исследовании методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в процессе высокоскоростной деформации в чистых металлах, неметаллических нановолокнах, поликристаллических нановолокнах, нановолокнах на основе Ni, Al и их сплавов. В конце первой главы сформулированы основные задачи диссертационной работы.

Вторая глава посвящена проблеме моделирования структурно-энергетических превращений в процессе высокоскоростного растяжения нановолокон. В работе исследовались структурно-энергетические превращения в нановолокнах Ni, Al и Ni₃Al (рис. 1). Размеры нановолокон составляли от 9270 до 13050 атомов. Плоскости боковых граней выбирались с наиболее плотной упаковкой, так как данное расположение атомов является наиболее энергетически выгодным, а, следовательно, наиболее устойчивым.

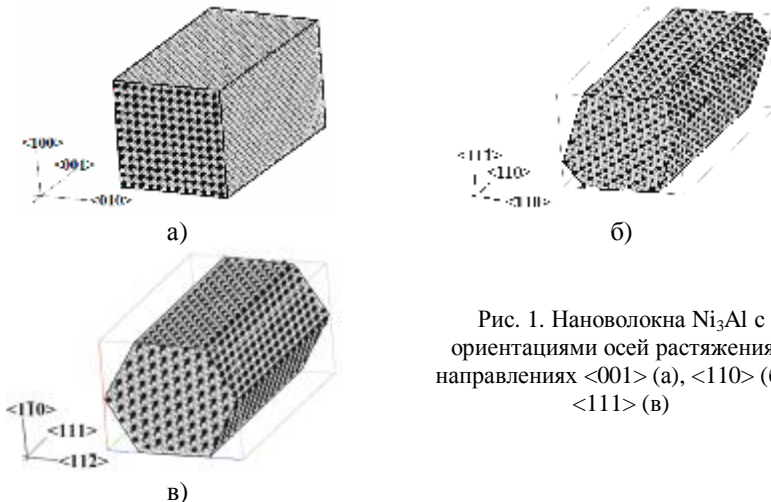


Рис. 1. Нановолокна Ni₃Al с ориентациями осей растяжения в направлениях <001> (а), <110> (б) и <111> (в)

Для краткости, в работе использовали следующие обозначения видов нановолокон: в начале указывалось направление оси растяжения, затем материал, например, «нановолокно <110> Ni₃Al».

При моделировании деформации в исследуемых нановолокнах происходило периодически повторяющееся поступательное смещение атомов, составляющих абсолютно жесткие захваты вдоль оси растяжения нановолокна в противоположных направлениях друг от друга. Структура абсолютно жестких захватов оставалась неизменной на протяжении всего эксперимента.

Недеформируемые абсолютно жесткие захваты смещались на 0,001 нм через каждые 0,1 пс. Суммарная скорость движения захватов составляла 20 м/с и соответствовала скорости деформации от $2,29 \cdot 10^9$ до $3,39 \cdot 10^9$ с⁻¹ в зависимости от длины исследуемого нановолокна. Такой порядок скоростей встречается в работах по моделированию деформации растяжения/сжатия [7-11]. Температура в компьютерном эксперименте устанавливалась равной 10 К, 300 К или близкой к температуре плавления соответствующего материала. В начале компьютерного эксперимента температура задавалась через скорости атомов, модули которых вычислялись по формуле (1):

$$|v_i| = \sqrt{\frac{2k_b T_0}{m_i}}, \quad (1)$$

где k_b – постоянная Больцмана, T_0 – заданная температура, m_i – масса атома i .

При деформации нановолокна на каждом шаге интегрирования производилась термостабилизация моделируемой системы по алгоритму Берендсена [12]. Структурная перестройка атомов внутри расчетного блока кристалла была реализована методом молекулярной динамики через решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона, описывающей движение частиц.

Для расчета взаимодействия между атомами выбраны парные потенциальные функции Морза:

$$j_{KL}(|r_i - r_j|) = D_{KL} b_{KL} \left(b_{KL} e^{-a_{KL}|r_i - r_j|} - 2 \right) \quad (2)$$

где j_{KL} – потенциал межатомного взаимодействия атомов сорта K и L , r_i и r_j – радиус-векторы атомов i и j , соответственно, D_{KL} , a_{KL} , b_{KL} – параметры потенциала межатомного взаимодействия между атомами сорта K и L , которые были заимствованы из работы [13]. Данный потенциал является хорошо апробированным для исследуемых материалов [14,15].

В главе также описана методика анализа структуры (определения ГЦК, ГПУ и ОЦК топологии соседей на первой координационной сфере) деформированного нановолокна, предложенная в [16] и успешно примененная в работах отечественных ученых [17,18].

Третья глава диссертации посвящена исследованию основных стадий структурно-энергетических превращений, происходящих в нановолокнах чистых ГЦК металлов Ni и Al при высокоскоростной деформации растяжения. В ходе исследований выявлены механизмы, реализующие структурно-энергетические превращения, характерные для конкретной стадии деформации, сделана попытка оценить влияние температуры на наблюдаемые превращения. Выявлено влияние ориентации оси растяжения нановолокна на особенности структурно-энергетических превращений в процессе деформации.

В результате исследования структурно-энергетических превращений происходящих в нановолокнах чистых ГЦК металлов в процессе высокоскоростной деформации растяжения выявлено четыре основных стадии

деформации: квазиупругая (I), пластическая (II), течения (III) и разрушения (IV). На каждой стадии деформации реализовывались характерные для нее механизмы структурно-энергетических превращений в нановолокне. Процессы структурно-энергетических превращений, происходящие в нановолокнах Ni и Al иллюстрируют графики зависимости запасенной энергии деформации и напряжений на захватах от времени (рис. 2 и 3).

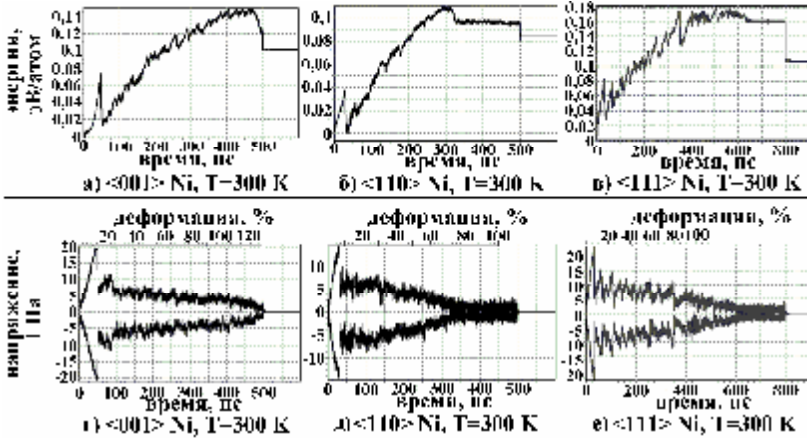


Рис. 2. Зависимость запасенной энергии деформации и напряжения на захватах от времени при температуре 300 K для нановолокон Ni

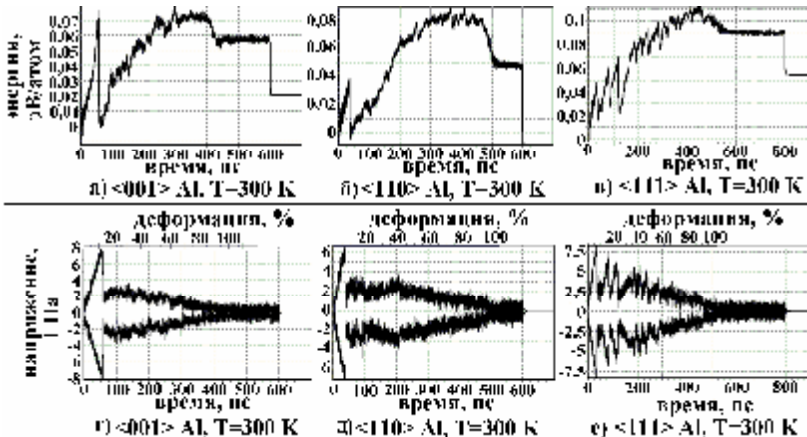


Рис. 3. Зависимость запасенной энергии деформации и напряжения на захватах от времени при температуре 300 K для нановолокон Al

На *квазиупругой* стадии деформации накапливались точечные дефекты (вакансии и междоузлия). Количество образующихся точечных дефектов на данной стадии деформации было прямо пропорционально температуре эксперимента. Запасенная энергия деформации изменялась по

параболическому закону (рис. 2 а, 3 а), напряжение на захватах росло линейно (рис. 2 (г,д,е), рис.3 (г,д,е)), в нановолокне отсутствовали атомы с ГПУ топологией ближайших соседей. В конце первой стадии деформации происходило проскальзывание участков нановолокна с образованием субструктурных блоков, на границах между субструктурными блоками образовались дефекты упаковки (ДУ). При этом происходило падение величины запасенной энергии деформации и напряжения на захватах.

Во время *пластической* деформации происходило проскальзывание блоков нановолокна преимущественно по плоскостям скольжения типа $\{111\}$. При этом на границах субструктурных блоков образовывались и исчезали ДУ. Особенности структурно-энергетических превращений на этой стадии зависели от ориентации оси растяжения, материала нановолокна и температуры эксперимента.

На стадии *течения* перестройка атомной структуры происходила преимущественно в области шейки, образовавшейся в конце второй стадии. Величины запасенной энергии деформации и напряжения на захватах изменялись на данной стадии незначительно.

В результате *разрушения* нановолокно разделялось на две части, перестройки атомной структуры не наблюдалось. После старта релаксации путем сверхбыстрого охлаждения до 0 К в некоторых случаях происходило образование новых дефектов упаковки и двойников или упорядочение структуры. Особенности структурно-энергетических превращений при этом зависели от температуры, материала нановолокна и ориентации оси растяжения.

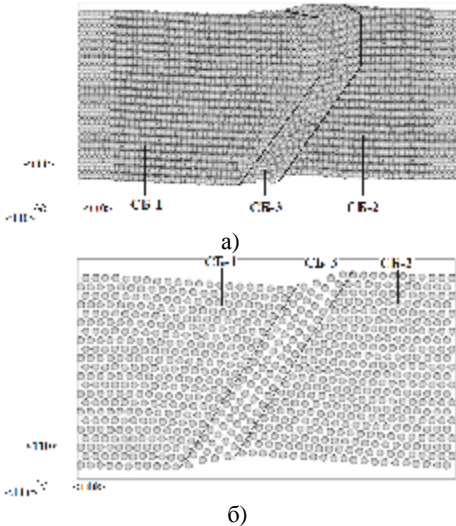


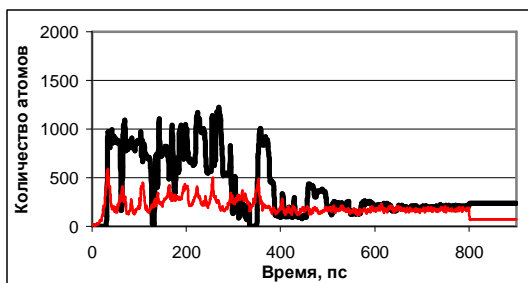
Рис. 4. Общий вид нановолокна $\langle 110 \rangle$ Ni при образовании субструктурного блока путем поворота участка нановолокна (а), расположение атомов плоскости (111) нановолокна $\langle 110 \rangle$ Ni после поворота участка (б) при температуре 300 К на 32 пс

Примечание: на рис. 4 (а) и (б) субструктурный блок СБ-3 образован поворотом участка нановолокна.

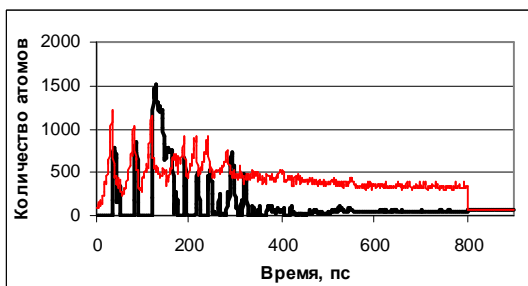
Ориентация оси растяжения нановолокна оказывала непосредственное влияние на особенности структурно-энергетических превращений на второй стадии деформации в процессе одноосного растяжения.

В случае ориентации оси растяжения в направлении $\langle 001 \rangle$ в нановолокнах наблюдалось скольжение атомных блоков преимущественно по плоскостям наиболее плотной упаковки типа $\{111\}$. При этом образовывались ДУ и двойники. При температурах 10 и 300 К в начале второй стадии деформации на боковых гранях нановолокон наблюдались линии скольжения, расположенные под углом $35\text{--}45^\circ$ к оси растяжения.

При ориентации оси растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ некоторые субструктурные блоки образовывались путем поворота участков нановолокна (рис. 4).



а)



б)

Рис. 5. Графики зависимости числа атомов с ГПУ (жирная линия) и промежуточной (тонкая линия) топологиями ближайших соседей от времени деформации при температуре 300 К в нановолокнах $\langle 111 \rangle$ Ni (а) и $\langle 111 \rangle$ Al (б)

В случае ориентации оси растяжения в направлении $\langle 111 \rangle$ при температурах 10 и 300 К наблюдалось повторяющееся восстановление кристаллической структуры (рис. 5 а, б). Из графиков на рис. 5 (а, б) видно, что появление дефектов упаковки сопровождается мгновенным ростом количества атомов с ГПУ топологией ближайших соседей. Длительность периодов, в течение которых структура нановолокна не разрушалась после рекристаллизации, и частота рекристаллизаций зависели от температуры и материала нановолокна. Нарушение структуры после таких периодов сопровождалось падениями значений запасенной энергии деформации (рис. 2 в, рис. 3 в) и напряжений на захватах (рис. 2 е, рис. 3 е).

Четвертая глава посвящена исследованиям структурно-энергетических превращений, имеющих место в процессе деформации нановолокон ГЦК интерметаллида Ni_3Al . В главе изучено влияние величины скорости деформации на характер структурно-энергетических превращений в нановолокнах Ni_3Al . Дан сравнительный анализ структурно-энергетических превращений, происходящих при высокоскоростном одноосном растяжении нановолокон Ni_3Al и чистых металлов Ni и Al .

В результате исследования структурно-энергетических превращений происходящих в нановолокнах ГЦК интерметаллида Ni_3Al в процессе высокоскоростной деформации растяжения выявлены такие же стадии деформации, как и в нановолокнах чистых металлов. На каждой стадии деформации нановолокон Ni_3Al реализовывались характерные для нее механизмы структурно-энергетических превращений в нановолокне.

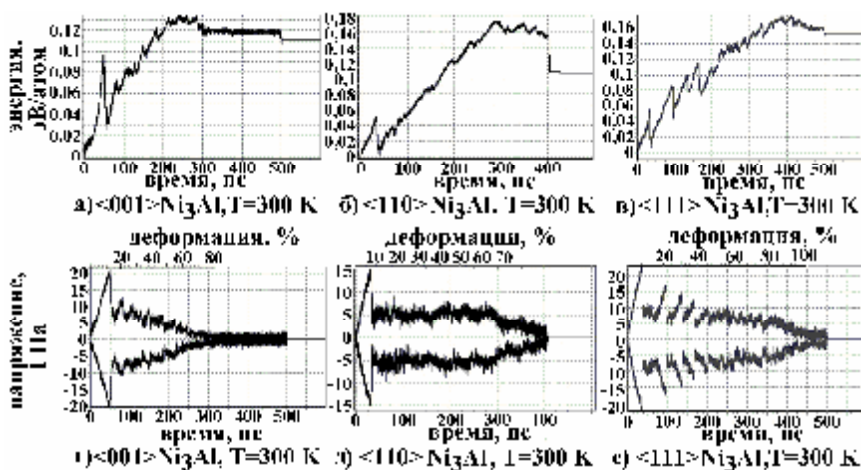


Рис. 6. Зависимость запасенной энергии деформации и напряжения на захватах от времени при температуре 300 К для нановолокон Ni_3Al

На *квазиупругой* стадии деформации происходило накопление вакансий, межузельных атомов и точечных дефектов замещения (ТДЗ). Количество точечных дефектов увеличивалось с ростом температуры эксперимента. Запасенная энергия деформации изменялась по параболическому закону (рис. 6 а,б,в), напряжение на захватах росло линейно (рис. 6 г,д,е), в нановолокне отсутствовали атомы с ГПУ топологией ближайших соседей. В конце первой стадии происходило проскальзывание частей нановолокна с образованием антифазных доменов (АФД). Границы АФД представляли собой сверхструктурные ДУ и антифазные границы (АФГ).

Во время *пластической* деформации происходило проскальзывание блоков нановолокна преимущественно по плоскостям скольжения типа $\{111\}$. Механизмы структурно-энергетических превращений на этой стадии зависели от ориентации оси растяжения, материала нановолокна и температуры

эксперимента. В нановолокнах Ni_3Al образовывались сверхструктурные дефекты в виде АФГ и АФД.

На стадии *течения* перестройка атомной структуры происходила преимущественно в области шейки, образовавшейся в конце второй стадии. Величины запасенной энергии деформации и напряжения на захватах изменялись на данной стадии незначительно.

После *разрушения* нановолокно разделялось на две части, перестройки атомной структуры не наблюдалось. На старте релаксации путем сверхбыстрого охлаждения до 0 К в некоторых случаях происходило образование новых дефектов или упорядочение структуры. Механизмы структурно-энергетических превращений при этом зависели от температуры, материала нановолокна и ориентации оси растяжения.

Ориентация оси растяжения нановолокна оказывала непосредственное влияние на особенности структурно-энергетических превращений в нановолокнах Ni_3Al на второй стадии деформации в процессе одноосного растяжения.

В случае ориентации оси растяжения в направлении $\langle 001 \rangle$ в нановолокнах наблюдалось скольжение атомных блоков преимущественно по плоскостям наиболее плотной упаковки типа $\{111\}$. При этом образовывались сверхструктурные ДУ и АФГ. При температурах 10 и 300 К в начале второй стадии деформации на боковой поверхности нановолокна видны линии скольжения, расположенные под углом $35\text{--}45^\circ$ к оси растяжения.

При ориентации оси растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ некоторые АФД образовывались путем поворота участков нановолокон.

В случае ориентации оси растяжения в направлении $\langle 111 \rangle$ при температурах 10 и 300 К наблюдалось повторяющееся восстановление кристаллической структуры с исчезновением ДУ. Длительность периодов, в течение которых структура нановолокна не разрушалась после рекристаллизации, и частота рекристаллизаций зависели от температуры и материала нановолокна.

Сравнительный анализ показал, что на особенности структурно-энергетических превращений в нановолокнах Ni, Al и Ni_3Al на всех этапах деформации влияла температура эксперимента.

Длительность первого этапа деформации и величина относительной деформации, соответствующая окончанию данного этапа, уменьшались с ростом температуры.

С ростом температуры среднее количество атомов с промежуточной топологией ближайших соседей в процессе высокоскоростной деформации увеличивалось. Данные атомы представляют собой большей частью атомы, сместившиеся в пространство между кристаллографическими плоскостями и образовавшие тем самым межузельные атомы, вакансии и точечные дефекты замещения. Последние образовывались только в сплаве. При температурах, близких к температурам плавления доля атомов с промежуточной топологией

ближайших соседей составляла в различных случаях 15-20 %, что говорит о высокой доле вакансий и межузельных атомов в нановолокне.

С увеличением температуры эксперимента снижалось значение предела текучести.

Величина температуры влияла на то, как часто в ходе второй стадии деформации происходила рекристаллизация (исчезновение ДУ) нановолокон Ni_3Al с ориентацией оси растяжения $\langle 111 \rangle$. Как и в нановолокнах $\langle 111 \rangle \text{Ni}$ при температуре 300 К частота их появления значительно ниже (через 23-72 пс), чем при температуре 10 К (через 10-30 пс). При температурах 10 К и 300 К, как и в случае нановолокон Ni , длительность периодов в которые не образовывались новые атомы с ГПУ топологией после восстановления структуры нановолокна существенно не отличалась.

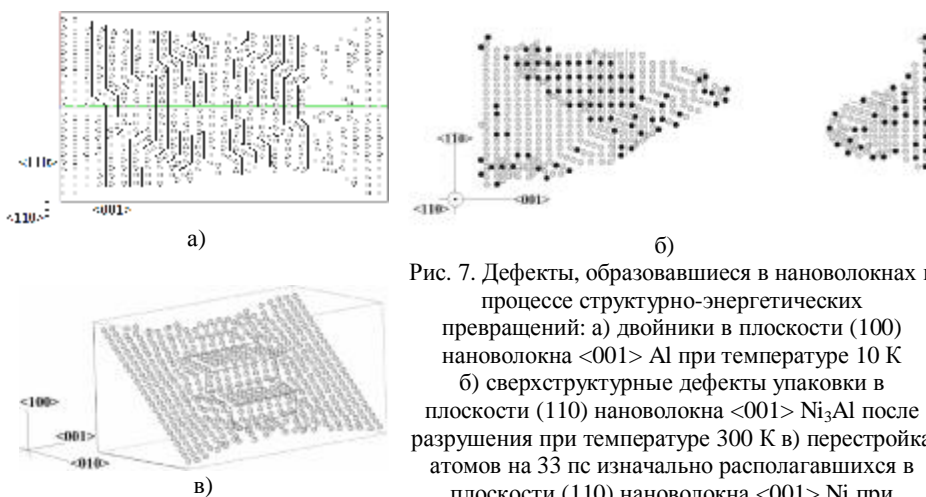


Рис. 7. Дефекты, образовавшиеся в нановолокнах в процессе структурно-энергетических превращений: а) двойники в плоскости (100) нановолокна $\langle 001 \rangle \text{Al}$ при температуре 10 К б) сверхструктурные дефекты упаковки в плоскости (110) нановолокна $\langle 001 \rangle \text{Ni}_3\text{Al}$ после разрушения при температуре 300 К в) перестройка атомов на 33 пс изначально располагавшихся в плоскости (110) нановолокна $\langle 001 \rangle \text{Ni}$ при температуре 1300 К

Сравнительный анализ показал, что структурно-энергетические превращения на второй стадии деформации, имеющие место при одноосном растяжении нановолокон Ni_3Al , Ni и Al могут быть обусловлены свойствами материала.

При температурах 10 и 300 К в результате структурно-энергетических превращений в процессе деформации в нановолокнах $\langle 001 \rangle \text{Al}$ и $\langle 001 \rangle \text{Ni}$ образовывались структурные дефекты – дефекты упаковки и двойники (рис. 7 а), в нановолокнах $\langle 001 \rangle \text{Ni}_3\text{Al}$ образовывались сверхструктурные дефекты в виде АФД и АФГ, которые сохранялись после разрушения (рис. 7 б). При температуре 300 К в начале второй стадии деформации на боковой поверхности нановолокна $\langle 001 \rangle \text{Al}$ образовалась полоса сдвига из нескольких параллельных линий скольжения, в остальных случаях при температурах 10 и 300 К на поверхности нановолокон $\langle 001 \rangle \text{Ni}$, $\langle 001 \rangle \text{Al}$ и $\langle 001 \rangle \text{Ni}_3\text{Al}$ образовывались единичные линии скольжения.

При температуре 1300 К в нановолокнах $\langle 001 \rangle$ Ni и $\langle 001 \rangle$ Ni₃Al образовывались «ступеньки» двойников в результате перестройки атомов, изначально располагавшихся в плоскостях типа {110}, параллельных оси растяжения (рис. 7 в). С увеличением деформации количество двойников увеличивалось. В нановолокнах $\langle 001 \rangle$ Al из-за большой подвижности атомов нановолокна, атомы смещались блоками геометрически неправильной формы, направления смещений были обусловлены действием деформирующей нагрузки.

При температурах 10 и 300 К в нановолокнах $\langle 110 \rangle$ Ni и $\langle 110 \rangle$ Al путем поворота участков образовывались и увеличивались в размерах субструктурные блоки, в нановолокнах $\langle 110 \rangle$ Ni₃Al при повороте участков образовывались АФД. Граница субструктурного блока $\langle 110 \rangle$ Al при температуре 10 К была образована двумя пересекающимися плоскостями типа {111}, в то время как границы блоков в нановолокне $\langle 110 \rangle$ Ni и АФД в нановолокне $\langle 110 \rangle$ Ni₃Al были параллельны друг другу и образованы строго одной плоскостью типа {111}.

Максимальная длительность периодов, во время которых структура нановолокна не претерпевала изменений после рекристаллизации (исчезновения ДУ) при температурах 10 и 300 К в нановолокнах $\langle 111 \rangle$ Al в 2-2,5 раза больше, чем в нановолокнах $\langle 111 \rangle$ Ni и $\langle 111 \rangle$ Ni₃Al.

Значение предела текучести для нановолокон Ni и Ni₃Al были в 1,9-3,0 раза больше соответствующих значений для нановолокон Al, что согласуется с соотношением объемных модулей упругости для данных материалов. Значения предела текучести совпали с данными, полученными в рамках других моделей.

На примере нановолокон Ni₃Al с ориентациями осей растяжения в направлениях $\langle 001 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ при температуре 300 К показано, что скорость деформации оказывает непосредственное влияние на особенности структурно-энергетических превращений в процессе одноосного растяжения, величину предела текучести и длительность первой стадии деформации (рис. 8).

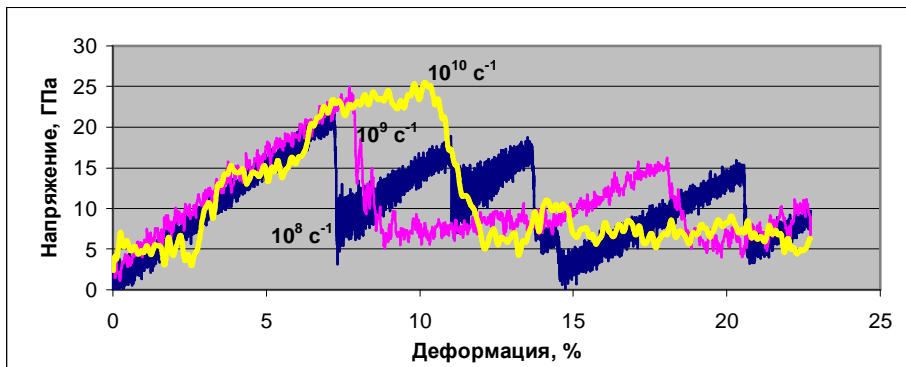


Рис. 8. Зависимость напряжения от величины относительной деформации для нановолокон $\langle 111 \rangle$ Ni₃Al при различных скоростях деформации

Из графиков следует, что величина предела текучести прямо пропорциональна скорости деформации. Подобные закономерности были установлены для ГЦК Au в работе [10]. С увеличением скорости деформации увеличивалось значение относительной деформации, при которой достигалось максимальное напряжение на захватах. При самой высокой из рассматриваемых скоростей деформации, составляющей порядка 10^{10} с^{-1} , вместо скольжения по плоскостям наиболее плотной упаковки при температуре 300 К наблюдалось разрушение структуры нановолокна.

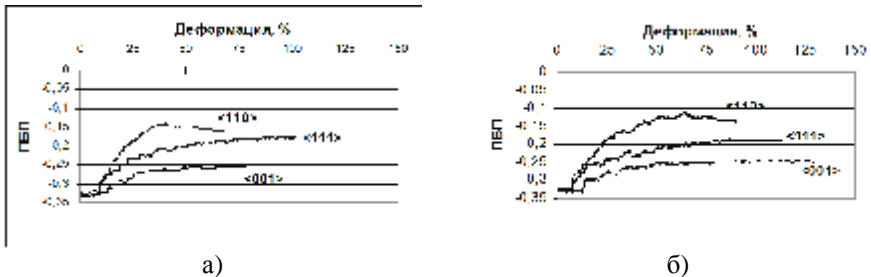


Рис. 9. Зависимость параметра ближнего порядка на первой координационной сфере в ГЦК области от величины относительной деформации для нановолокон Ni₃Al при температурах 10 К (а) и 300 К (б)

На примере нановолокон Ni₃Al показано, что скорость нарушения ближнего порядка в результате структурно-энергетических превращений в процессе деформации, зависит от ориентации оси растяжения. При температурах 10 и 300 К наибольшее нарушение ближнего порядка в ГЦК области происходило в нановолокнах с ориентацией оси растяжения в направлении <110>, наименьшее в нановолокнах с ориентацией оси растяжения в направлении <001> (рис. 9 а,б). При температуре 1300 К ориентация оси растяжения не оказывала влияния на скорость нарушения ближнего порядка атомов в ГЦК области.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. В процессе деформации растяжения нановолокон ГЦК металлов Ni, Al и Ni₃Al выявлены четыре стадии структурно-энергетических превращений: квазиупругая, пластическая, течения и разрушения. На первой стадии образуются точечные дефекты – вакансии и междоузлия. В нановолокнах сплавов образуются ТДЗ. Первая стадия структурно-энергетических превращений в процессе деформации заканчивается образованием планарных дефектов. В чистых металлах в результате проскальзывания частей нановолокна образуются дефекты упаковки. В нановолокнах Ni₃Al в конце первой стадии деформации образуются границы антифазных доменов в виде антифазных границ и сверхструктурных дефектов упаковки. На стадии пластической деформации в нановолокнах чистых металлов образуются новые ДУ, в

нановолокнах Ni_3Al – новые сверхструктурные ДУ. Структурно-энергетические превращения на третьей стадии происходят только в области шейки, образовавшейся в конце второй стадии деформации. В процессе структурно-энергетических превращений во время течения новые ДУ не образуются, направления смещений атомов в области шейки обусловлены действием деформирующей нагрузки.

2. Ориентация оси растяжения и форма нановолокна оказывают влияние на особенности структурно-энергетических превращений в нановолокнах ГЦК металлов. При ориентации оси растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ субструктурные блоки (чистые металлы) и антифазные домены (сплавы) образуются поворотом участков нановолокна, при ориентации оси растяжения в направлении $\langle 111 \rangle$ наблюдается повторяющееся восстановление кристаллической структуры нановолокна с полным исчезновением структурных ДУ (атомов с ГПУ топологией ближайших соседей).

3. С увеличением температуры, при которой происходит высокоскоростное растяжение, увеличивается длительность первой стадии деформации и количество точечных дефектов, накапливаемых на первой стадии. Величина предела текучести обратно пропорциональна температуре эксперимента.

4. При увеличении скорости деформации увеличивается величина предела текучести и относительной деформации в конце первой стадии.

5. Наибольшая потеря ближнего порядка при температурах 10 и 300 К наблюдается в нановолокнах $\langle 110 \rangle \text{Ni}_3\text{Al}$, наименьшая – в нановолокнах $\langle 001 \rangle \text{Ni}_3\text{Al}$. При температуре 1300 К направление оси растяжения не влияет на скорость разрушения ближнего порядка в ГЦК области Ni_3Al .

ЛИТЕРАТУРА

1. Поздняков В.А. Физическое материаловедение наноструктурных материалов. – М.: МГИУ, 2007. – 424 с.
2. Рыжонков Д.И., Лёвина В.В., Дзидзигури Э.Л. Наноматериалы. – М.: Бинном. Лаборатория знаний, 2008. – 365 с.
3. Шукейло Ю.А., Кормилицын О.П. Механика материалов и структур нано- и микротехники. – С.-Пб.: Academia, 2008. – 224 с.
4. Инденбом В.Л., Орлов А.Н. Проблема разрушения в физике прочности // Проблемы прочности. – 1970. – № 12. – С. 3-22.
5. Мышляев М.М., Шпейзман В.В., Камалов М.М. Стадийность деформации микрокристаллического алюминий-литиевого сплава в условиях сверхпластичности // ФТТ. – 2001. – Т. 43, № 11. – С. 2015-2020.
6. Панин А.В., Сон А.А., Иванов Ю.Ф., Копылов В.И. Особенности локализации и стадийности пластической деформации субмикроструктурного армко-железа с полосовой фрагментированной субструктурой // Физическая мезомеханика. – 2004. – Т. 7, № 3. – С. 13-16.
7. Liang W., Zhou M. Size and strain rate effects in tensile deformation of Cu nanowires // Nanotech. – 2003. – V. 2. – P. 452-455.

8. Ji C., Park H.S. Geometric effects on the inelastic deformation of metal nanowires // Appl. Phys. Lett. – 2006. – V. 89. – P. 181916.
9. Park H.S., Laohom V. Surface composition effects on martensitic phase transformation in nickel aluminum nanowires // Philosophical Magazine. – 2007. – V. 87. – P. 2159-2168.
10. Koh S.J.A., Lee H.P. Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires // Nanotechnology. - 2006. – V. 17. – P. 3451–3467.
11. Зольников К.П. Нелинейный отклик материалов на макромасштабном уровне при высокоэнергетических воздействиях. Автореферат диссертации на соискание ученой степени д. ф.-м. н. - Томск, 2002. - 35 с.
12. Berendsen H.J.C., et al. Molecular-dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. - 1984. – V. 81, № 8, P. 3684-3690.
13. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B и $A_3B(C)$. Диссертация на соискание ученой степени к. ф.-м. н. - Томск, 1987. - 214 с.
14. Ракитин Р.Ю. Исследование механизмов диффузии по границам зерен в ГЦК металлах. Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.ф.-м. н. - Барнаул, 2006. - 23 с.
15. Полетаев Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах. Автореферат диссертации на соискание ученой степени д. ф.-м. н. - Барнаул, 2008. - 38 с.
16. Van Swygenhoven H., Farkas D., Caro A. Grain-boundary structures in polycrystalline metals at the nanoscale // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 62, № 2. - P. 831-838.
17. Крыжевич Д.С. Исследование зарождения пластической деформации в ГЦК материалах на атомном уровне. Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.ф.-м.н. - Томск, 2009. - 17 с.
18. Псахье С.Г., Зольников К.П., Крыжевич Д.С., Липницкий А.Г. Молекулярно-динамическое исследование возможности термофлуктуационного механизма генерации структурных дефектов при высокоскоростной деформации // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32, № 3. – С. 14-18.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

Статьи, опубликованные в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

1. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Сеница Н.В. Исследование структурных превращений в сплаве Ni_3Al под действием одноосной деформации растяжением // Деформация и разрушение материалов. – 2009. - № 6. - С. 28-31.
2. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е. Структурно-энергетические превращения в металлических нановолокнах в условиях высокоскоростной динамической деформации растяжения // Перспективные материалы. - 2009. - Специальный выпуск №7. - С. 383-388.

Статьи, опубликованные в международных изданиях:

3. Starostenkov M.D., **Yashin A.V.**, Sinita N.V., Dudnik E.A. Atomic mechanisms of structural reconstruction of FCC-metals in the process of tension deformation // CD disk, Proceedings of 12th International Conference on Fracture. – 2009. - Ottawa, Ontario, Canada. - fin00236, PP. 1-9.

Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ:

4. Дудник Е.А., Синица Н.В., Старостенков М.Д., **Яшин А.В.** Моделирование структурных превращений в сплавах методом молекулярной динамики при различных температурах с использованием парных потенциалов Морза (ДИНАМИКА). - Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ №2007611472 от 09.04.2007 г.

Прочие статьи:

5. Синица Н.В., **Яшин А.В.** Моделирование структурных превращений в интерметаллиде Ni₃Al методом молекулярной динамики // Материалы Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Проблемы социального и научно-технического развития в современном мире». – Рубцовск: РИО РИИ, 2007. – С. 62-64.

6. **Яшин А.В.**, Синица Н.В. Влияние деформации на намагниченность в сплавах // Сборник трудов XIV Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии». - Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2008. - Т.3.- С.154-156.

7. **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Синица Н.В., Старостенков М.Д. Исследование упругой стадии деформации при одноосном динамическом растяжении // Материалы XVIII петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов. - С-Петербург, 2008. - С. 59-61.

8. **Яшин А.В.** Деформация в сплавах сверхструктуры L1₂ при разрыве // Материалы III (XXXV) Международной научно-практической конференции «Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей». - Кемерово: ООО «ИНТ», 2008. - С.524-527.

9. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Синица Н.В. Исследование структурных превращений в бинарном сплаве под действием деформации растяжения // Материалы XLVII Международной конференции «Актуальные проблемы прочности». - Н.Новгород, 2008 – С. 48-50.

10. **Яшин А.В.**, Синица Н.В., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. Процессы атомной перестройки при динамическом растяжении // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2008. – №5. - С. 16-20.

11. **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Синица Н.В. Исследование влияния одноосной деформации на свойства сплавов сверхструктуры L1₂ // Сборник тезисов докладов открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и

наноструктурные материалы – 2008» – Уфа, Башкирский государственный университет, 2008. - С. 240-241.

12. **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Дудник Д.В. Деформация в сплавах сверхструктуры $L1_2$ // Материалы X всероссийской научно-технической конференции «Проблемы социального и научно-технического развития в современном мире». – Рубцовск: РИО РИИ, 2008. - С.57-60.

13. Дудник Е.А., Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Сеница Н.В. Исследование механизмов разрушения в сплаве Ni_3Al под действием деформации растяжения // Сборник материалов V Всероссийской конференции «Механика микронеоднородных материалов и разрушение». - Екатеринбург: ИМАШ УрО РАН, 2008. - С.39.

14. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Хорошилов Д.Е., Дудник Е.А., Тихонова Т.А. Влияние носителей свободного объема на характер деформации ГЦК кристалла // Сборник тезисов V Международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов». - Черногоровка, 2008. – С. 66.

15. Дудник Е.А., Сеница Н.В., **Яшин А.В.**, Старостенков М.Д. Исследование влияния дефекта упаковки на структурные превращения в упорядочивающихся сплавах и интерметаллидах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2008. - №3. - С. 79-83.

16. Глезер А.М., Старостенков М.Д., Дудник Е.А., **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е. Исследование атомных механизмов перестройки в сплаве Ni_3Al при одноосной деформации растяжения // Труды 11-го Международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-11). - Ростов-на-Дону, п. Лоо: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН. – 2008. – Т. 1. - С. 141-144.

17. Starostenkov M.D., **Yashin A.V.**, Sinitsa N.V. Atomic mechanisms of structural reconstruction of nanocrystal FCC at an impulsive deformation // Book of Abstract: 2008 E-MRS Fall Meeting and Exhibit. – Aug. 2008. - PP. 170.

18. Starostenkov M.D., **Yashin A.V.**, Tereschenko O.A., Pozhidaeva O.V., Medvedev N.N. The formation of aggregates from Ni atoms at the impulsive high-intensive influences on Ni_3Al intermetallide // Book of Abstract: 2008 E-MRS Fall Meeting and Exhibit. – Aug. 2008. - PP. 183.

19. **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Исследование перераспределения атомных связей на участках структурных разрушений в сплаве Ni_3Al // Сборник статей 9-й Всероссийской научной конференции «Краевые задачи и математическое моделирование» – Новокузнецк: НФИ ГОУ ВПО «КемГУ», 2008. – Т.2. – С. 95-98.

20. **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Исследование участков сверхструктурных разрушений при одноосной динамической деформации в сплаве Ni_3Al // Материалы Международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые - науке, технологиям и профессиональному образованию». - М.: Энергоатомиздат. - 2008. – Ч. 3. - С. 160-163.

21. Тажибаева Г.Б., Квеглис Л.И., Дудник Е.А., **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Абылкалыкова Р.Б., Носков Ф.М. Структурные и магнитные превращения в сплаве Ni_3Al // Материалы 1-ой Международной Казахстано-Российско-

Японской конференции «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов». - Усть-Каменогорск, ВКГТУ. – 2008. - С. 446-451.

22. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е. Исследование динамической деформации нановолокна Ni_3Al с осью растяжения $\langle 111 \rangle$ // Материалы I Региональной научно-практической конференции «Перспективы развития nanoиндустрии Алтая. Анализ состояния патентно-лицензионной деятельности нанотехнологической сети региона». – Бийск: ФГУП «ФНПЦ «Алтай». – 2009. - С. 35-36.

23. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Хорошилов Д.Е. Исследование процесса структурной и сверхструктурной перестройки металлического нановолокна при одноосной деформации растяжения в направлении $\langle 111 \rangle$ // Сборник тезисов Международного симпозиума «Перспективные материалы и технологии». – Витебск: УО «ВГТУ». - 2009. – С. 54.

24. **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. Компьютерное моделирование структурно-энергетических превращений в нановолокне Ni_3Al при одноосной деформации // Тезисы докладов II Всероссийской конференции с интернет-участием «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к nanoиндустрии». - Ижевск: Изд-во ИжГТУ. – 2009. - С. 143.

25. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Сеница Н.В. Исследование атомных механизмов разрушения нановолокон // Тезисы VI Международной конференции «Математическое моделирование в образовании, науке и производстве» – Тирасполь: Изд-во Приднестровского университета. – 2009. - С. 98-99.

26. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е. Исследование атомных механизмов перестройки в сплаве Ni_3Al при одноосной деформации растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ // Труды 12-го Международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-12). - Ростов-на-Дону, п. Лоо: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН. – 2009. - Т. 2. – С. 252-256.

27. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е. Исследование процессов атомной перестройки в нановолокне сплава Ni_3Al подвергнутого одноосной деформации растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2009. - №1. - С. 74-80.

28. Старостенков М.Д., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е. Исследование нановолокон металлов и сплавов на основе ГЦК-решетки // Сборник материалов III международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (DFMN-09). - М: Интерконтакт Наука. - 2009. - С. 395-396.

29. Глезер А.М. Исследование атомных механизмов перестройки в сплаве Ni_3Al при одноосной деформации растяжения [Электронный ресурс] / А.М. Глезер, М.Д. Старостенков, Е.А. Дудник, **А.В. Яшин**, Н.В. Сеница, Д.Е. Хорошилов // Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы. – 2009, № 10. – Режим доступа: <http://www.ptosnm.ru/catalog/i/470>. Дата обращения: 01.02.2010.
30. **Яшин А.В.**, Мясниченко В.С. Исследование прочностных свойств ГЦК металлов при одноосной динамической деформации растяжением в направлении $\langle 110 \rangle$ // Труды Всероссийской конференции с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы. Создание, структура, свойства» – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – С. 86-90.
31. **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Кононов И.Н. Структурные и сверхструктурные изменения, происходящие в нановолокне Ni_3Al в процессе высокоскоростной деформации // Сборник трудов XV Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Современная техника и технологии» – Томск: Изд-во Томского политехнического университета. - 2009. - Т. 3.– С. 545-547.
32. Сеница Н.В., Старостенков М.Д., Хорошилов Д.Е., **Яшин А.В.**, Дудник Е.А. Влияние концентрации точечных дефектов на особенности процесса деформации и разрушения нановолокна интерметаллида Ni_3Al // Сборник тезисов XVII Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» – Самара: Самарский государственный технический университет. - 2009. – С. 212-213.
33. Квеглис Л.И., Дудник Е.А., **Яшин А.В.**, Сеница Н.В., Абылкалыкова Р.Б., Носков Ф.М., Тажибаева Г.Б. Структурные и магнитные превращения в сплаве Ni_3Al // Труды VII Международной Российско-Казахстано-Японской научной конференции «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов». – Волгоград. – 2009. - С. 742-746.