

УДК 539.3

М.Л.Федосеев (5 курс, каф. ФМиКТМ), И.А.Овидько, д.ф.-м.н., проф.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСФОРМАЦИЙ ДИСЛОКАЦИОННЫХ КОНФИГУРАЦИЙ
В НАНОМАТЕРИАЛАХ С БИМОДАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию процессов пластической деформации в наноматериалах нового типа, а именно наноматериалах с бимодальной структурой [1-6]. Предложена модель, описывающая испускание частичной дислокации в крупное зерно с границ нанозерен при различных значениях внешнего напряжения. В рамках этой модели дислокации испускаются под действием как внешнего напряжения, так и напряжения, создаваемого дислокациями в скоплениях, расположенных по границам нанозерен. Исследовано наиболее выгодное направление скольжения дислокации внутри зерна. Получены зависимости изменения полной энергии системы от смещения испущенных частичных дислокаций, которые показывают, что при достаточно высоком уровне внешнего напряжения такое испускание становится энергетически выгодным. Рассмотрена также модель повторного испускания частичных дислокаций из тройного стыка внутрь зерна. Определены те области изменения параметров системы, которые соответствуют необходимым условиям реализации этого процесса. Показано, что при определенных значениях параметров испускание выгодно, при других – нет.

Было выяснено, что чем больше приложенное сдвиговое напряжение τ и/или меньше угол α между векторами Бюргерса дислокаций вне зерна и дислокации, испущенной в зерно, тем меньше барьер, преодолеваемый первой испускаемой дислокацией для того, чтобы начать движение. Так, для значений $\tau = 200$ МПа испускание первой дислокации вообще не выгодно ни при одном из рассмотренных углов. Если все же это произойдет, то испускание уже второй частичной дислокации будет энергетически выгодным. При таком значении τ испускание первой частичной решеточной дислокации станет возможным при увеличении числа дислокаций в скоплении.

На основе проведенного анализа можно предположить упрощенную схему того, как будут двигаться испущенные дислокации в большом зерне. Сначала в зерно испускается первая (ведущая) частичная дислокация, за которой формируется полоса дефекта упаковки. Эта дислокация скользит в зерне до тех пор, пока изменение энергии системы не достигнет минимума. На расстоянии, соответствующем этому минимуму, дислокация останавливается. После этого в зерно испускается вторая (ведомая) частичная дислокация, которая по мере своего скольжения уменьшает ширину полосы дефекта упаковки. Она скользит до тех пор, пока не подойдет на некоторое равновесное расстояние к первой испущенной дислокации. Чем выше значение приложенного напряжения, тем ближе окажутся эти дислокации. После этого обе дислокации начинают совместное движение вглубь зерна. Можно предположить, что в дальнейшем этот механизм может повториться и для последующих дислокаций.

Рассмотренная модель испускания решеточных дислокаций из головы заторможенного скопления зернограницных дислокаций дает наглядное представление о механизмах перехода от зернограницного скольжения к решеточному в наноматериалах с бимодальной структурой.

ЛИТЕРАТУРА:

1. М.Ю.Гуткин, И.А.Овидько. Физическая механика деформируемых наноструктур. Том. I. Нанокристаллические материалы. СПб, Янус, 2003, 194 с.
2. M.Lergos, B.R.Elliott, M.N.Rittner, J. Weertman, K.J.Hemker. Phil. Mag. 2000; A 80, 1017.
3. R.Z.Valiev, I.V.Alexandrov, Y.T.Zhu & T.C.Lowe. J. Mater Res. 2002; 17, 5.

4. P.G.Sanders, J.A.Eastman & J.R.Weertman. Acta Materialia 1997; 45, 4019.
5. М.Ю.Гуткин, И.А.Овидько. Дефекты и механизмы пластичности в наноструктурных и некристаллических материалах. СПб.: Янус, 2001, 180 с.
6. Д.Эшелби. Континуальная теория дислокаций. М.: Иностранная литература, 1963, 248 с.