

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Математико-механический факультет

Кафедра теории упругости

Дружинин Даниил Андреевич

Пластическая деформация посредством коллективных наномасштабных  
сдвигов в нанопроволоках.

Выпускная работа бакалавра.

Допущена к защите.

Зав.кафедрой:

академик РАН, профессор, Морозов Н.Ф.

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., зав.лаб. механики наноматериалов  
и теории дефектов ИПМаш РАН, Овидько И.А.

Рецензент:

д.ф.-м.н., в.н.с. лаб. механики наноматериалов  
и теории дефектов ИПМаш РАН, Шейнерман А.Г.

Санкт-Петербург

2012

## Оглавление

Введение. ....	3
Глава 1. Особенности процессов пластической деформации в нанопроволоках (краткий обзор). ....	5
Глава 2. Модель регулярной структуры. ....	8
§1. Постановка задачи. ....	8
§2. Расчет энергетических характеристик. ....	10
§3. Полученный результат. ....	14
§4. Анализ результата. ....	17
Глава 3. Модель ступенчатой структуры. ....	19
§1. Постановка задачи. ....	19
§2. Расчет энергетических характеристик. ....	20
§3. Полученный результат. ....	24
§4. Анализ результата. ....	27
Выводы. ....	29
Список литературы. ....	31

## **Введение.**

В течение последнего десятилетия нанопроволоки (проволоки наномасштабного размера) интенсивно исследуются. Это связано с их уникальными механическими и физическими свойствами. Несмотря на то, что в этой области был достигнут заметный прогресс, остаются многие вопросы, которые требуют изучения.

В последнее время большое внимание уделяется механизму пластической деформации в объектах наномасштабного размера, значительная часть которого приходится на изучение процессов пластической деформации в нанопроволоках. Повышенный интерес к этой проблеме объясняется их потенциальным применением в современных технологиях, таких как микроэлектромеханические системы (MEMS), нанобиоэлектроника, получившая значительный рост последнее время, и другие разделы нанотехнологий. Например, в этом году в США был произведен кабель с использованием нанопроволоки из золота [19].

Цель настоящей работы – построение теоретических моделей пластической деформации бездефектных нанопроволок на основе механизма коллективного зарождения и роста нановозмущений.

Для достижения цели были поставлены и реализованы следующие основные задачи:

- изучение уже имеющихся моделей деформирования нанопроволок;
- описание модели регулярной структуры, представляющей собой механизм деформации нанопроволоки посредством синхронного движения ансамбля нановозмущений;
- расчет энергетических характеристик механизма;
- разбор полученных результатов и сравнение с уже имеющимися теориями;

- описание модели ступенчатой структуры, представляющей собой механизм деформации нанопроволоки посредством последовательное зарождение ансамбля нановозмущений;
- расчет энергетических характеристик механизма;
- разбор полученных результатов и сравнение их с предшествующей моделью, классическим представлением, а также ранее предложенным механизмом [7].

Результаты работы опубликованы в статье:

С.В. Бобылев, Д.А. Дружинин, И.А. Овидько. Пластическая деформации посредством коллективного зарождения нановозмущений // Физика и механика материалов, Т. 14, №1. С. 47-56.

## **Глава 1. Особенности процессов пластической деформации в нанопроволоках (краткий обзор).**

В ряде экспериментов [1-4] показано, что металлические нанопроволоки с диаметром в диапазоне 200–500 нм под действием сжимающих напряжений проявляет прочность в 10–50 раз превосходящую таковую для массивных образцов с тем же химическим составом. Это поведение материала называется размерным эффектом и представляет собой драматический рост механической прочности нанопроволок при уменьшении диаметра. Для объяснения этого эффекта Грир и Никс [2,3] предложили идею дислокационного обеднения (dislocation starvation). Согласно их модели, изначально существующие в нанопроволоке дислокации, быстро исчезают, выходя на свободную поверхность на начальной стадии деформации. В итоге формируется бездислокационная структура, для пластической деформации которой необходимы очень большие механические напряжения. Такое объяснение, в свою очередь, ставит новый вопрос о механизмах пластичности в свободных от дислокаций нанопроволоках.

Компьютерные модели [5,6] пластической деформации показали, что в изначально свободных от дефектов механически нагружаемых нанопроволоках дислокации способны зарождаться на свободной поверхности. В настоящей работе предлагается альтернативный механизм пластической деформации бездефектных нанопроволок. Механизм представляет собой коллективное зарождение и рост нановозмущений – наноскопических областей идеального сдвига с малыми величинами вектора сдвига, образующихся вблизи свободной поверхности. Эти приповерхностные нановозмущения подобны нановозмущениям [9–11], которые наблюдались в эксперименте [12] внутри зерен специальных титановых сплавов в процессе пластической деформации. Предлагаемый в настоящей работе механизм является дальнейшим развитием модели, предложенной в работе [7].

Сущность механизма заключается в следующем: на начальной стадии пластической деформации приложенное сдвиговое напряжение вызывает мгновенный сдвиг в некоторой кристаллографической плоскости. Сдвиг характеризуется малой величиной  $s$  и приводит к формированию обобщенного дефекта упаковки в области, охваченной этим сдвигом.

В теории дефектов обобщенный дефект определяется как результат разреза идеального кристалла в некоторой плоскости на две части, смещения этих частей на произвольный вектор  $\mathbf{s}$  (лежащий в плоскости разреза) и обратного соединения (см., например, [13,14]). При этом в теле зерна обобщенный дефект упаковки ограничен некристаллографической дислокацией с вектором Бюргерса, равным вектору сдвига  $\mathbf{s}$ . Из определения следует, что вектор Бюргерса имеет, вообще говоря, произвольную величину. Однако рассматривать имеет смысл диапазон значений  $s < b$ , где  $b$  модуль вектора Бюргерса частичной решеточной дислокации. Описанный дефект мы называем нановозмущением. Оно способно расти как за счет увеличения  $s$ , так и увеличения своей длины (т.е. фактически скольжения некристаллографической дислокации). Когда  $s$  достигает величины  $b$  нановозмущение трансформируется в стандартную частичную дислокацию, соединенную стабильным дефектом упаковки (частный случай обобщенного дефекта с минимальной энергией) со свободной поверхностью. Далее такая дислокация может выходить на поверхность и исчезать.

В работе [7] рассматривалось зарождение одиночного нановозмущения. На практике, однако, можно предполагать, что нановозмущения способны зарождаться целыми ансамблями. Это предположение основано на том факте, что определенные дислокационные конфигурации являются самоэкранированными. Поля дислокаций в таких конфигурациях взаимно компенсируются, и теоретически вполне возможно, что зарождение одиночного нановозмущения менее выгодно, чем ансамбля нановозмущений, организованного в низкоэнергетическую конфигурацию.

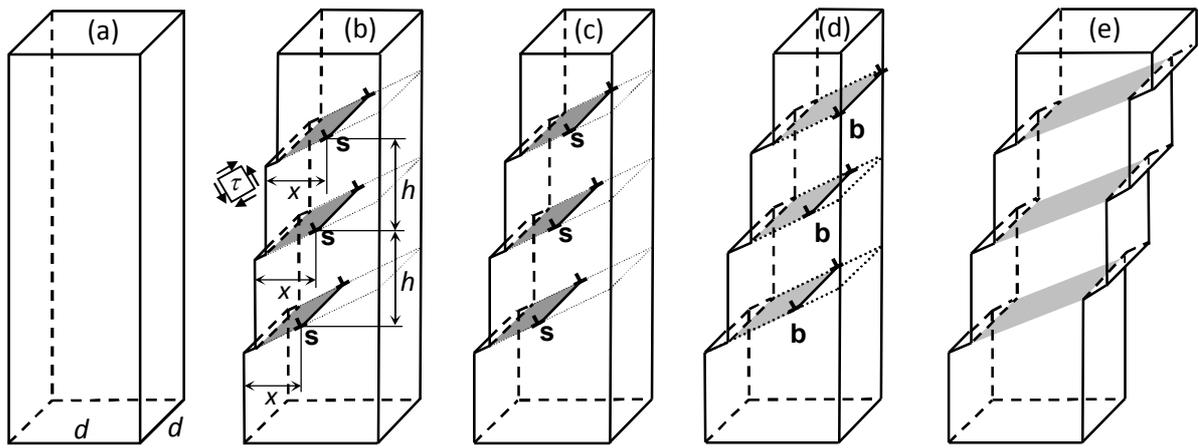
Примером таких ансамблей являются, например, дислокационные стенки, диполи и т.д.

Ниже описаны механизмы пластической деформации как зарождения ансамбля нановозмущений, переходящего в синхронное движение дислокационной стенки, и последовательного зарождения нановозмущений, образующих ступенчатую структуру, которая вырастает в движение наклоненной дислокационной стенки. В работе поочередно описаны обе модели, проведены соответствующие расчеты энергетических характеристик, приведены иллюстрации, поясняющие механизм в целом и особенности каждой предложенной модели. Рассмотрение каждого случая завершается кратким сравнением с уже полученными результатами, после чего следует общий вывод о проделанной работе.

## Глава 2. Модель регулярной структуры.

### §1. Постановка задачи.

Рассмотрим процесс пластической деформации в монокристаллической нанопроволоке, имеющей форму вытянутого параллелепипеда с квадратным сечением  $d \times d$  (рис.1а). Рассмотрим ситуацию, когда нановозмущения образуют регулярную структуру, показанную на рис. 1b-d. В данном случае синхронно зарождаются  $N$  абсолютно одинаковых (как по длине, так и по величине  $s$ ) нановозмущений (для компактности на рис. 1 изображен случай с  $N = 3$ ), образующих регулярную дислокационную стенку с периодом  $h$ . При этом все дислокации находятся на одинаковом расстоянии  $x$  от свободной поверхности. Серым цветом на рис. 1 показаны обобщенные дефекты упаковки. На свободной поверхности образуются ступеньки с шириной равной сдвигу в точках, на которых зародились нановозмущения. Далее мы предполагаем, что нановозмущения синхронно растут (рис. 1с), в определенный момент трансформируясь в решеточные частичные дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  (рис. 1d), и затем выходят на свободную поверхность, образуя конечную структуру (рис. 1е).



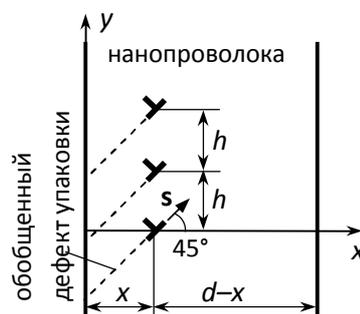
**Рис. 1.** Пластическая деформация нанопроволоки путем коллективного зарождения нановозмущений. (a) Исходное свободное от дефектов состояние. (b) и (c) Ансамбль нановозмущений зарождается и растет. Вектор Бюргера  $s$  постепенно возрастает от 0 до  $b$ , обобщенные дефекты упаковки (серые области) эволюционируют параллельно с ростом  $s$ . (d) Нановозмущения трансформируются в стандартные частичные решеточные дислокации (когда  $s$  достигает величины  $b$ ). (e) Конечная конфигурация, формирующаяся после того, как дислокации выходят на поверхность нанопроволоки и исчезают.

## §2. Расчет энергетических характеристик.

Рассчитаем изменение энергии  $\Delta W$  системы, связанное с формированием ансамбля из  $N$  нановозмущений в нанопроволоке (рис. 1). В рамках модели считается, что пластический сдвиг происходит в плоскости, наклоненной под углом  $45^\circ$  к основанию нанопроволоки, под действием сдвигового напряжения  $\tau$ , действующего в этой плоскости. Нанопроволока предполагается упругоизотропным телом, характеризующимся модулем сдвига  $G$  и коэффициентом Пуассона  $\nu$  и находящимся под действием приложенного постоянного растягивающего напряжения. Изменение энергии  $\Delta W$ , представляющее собой разницу энергий нанопроволоки с ансамблем нановозмущений и исходной бездефектной нанопроволоки, можно представить в следующем виде:

$$\Delta W = N(W_d + W_s + W_\gamma - A) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N W_{int}^{i-j},$$

где  $W_d$  - собственная энергия дислокации,  $W_s$  - энергия ступеньки, образующейся на свободной поверхности при зарождении дислокации,  $W_\gamma$  - энергия обобщенного дефекта упаковки,  $A$  - работа напряжения  $\tau$  по перемещению дислокации,  $W_{int}^{i-j}$  - энергия парного взаимодействия двух краевых дислокаций.



**Рис. 2.** Упрощенная модельная конфигурация дислокаций, используемая для расчета энергетических характеристик дислокационной системы.

Величины  $W_d$ ,  $W_s$ ,  $W_\gamma$  и  $A$  были рассчитаны в работе [7]. При этом использовалась несколько упрощенная модельная конфигурация, показанная на рис.2. При вычислении дислокационной энергии  $W_d$  использовалось приближение бесконечной прямолинейной краевой дислокации у свободной поверхности (в полупространстве), поскольку аналитическое выражение для энергии дислокации конечной длины в нанопроволоке квадратного сечения  $W_d$  неизвестно. Наличие ступенек на свободной поверхности в расчете игнорировалось по той же причине, т.е. поверхность считалась плоской (см. рис.2). Энергия  $W_d$  в расчете на единицу длины дислокации, как и все прочие энергии фигурирующие в (1), задается следующей формулой [7]:

$$W_d = \frac{Ds^2}{2} \left( \ln\left(\frac{x^*}{s}\right) + 1 \right).$$

Здесь  $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$ ,  $s$  - модуль вектора Бюргера дислокации,  $x^* = \min(x, d - x)$ , - расстояние от дислокации до свободной поверхности, на которой она зародилась,  $d$  - ширина нанопроволоки (рис. 1). Функция определена как минимум из двух величин  $x$  и  $d - x$ . Т.е. хотя и используется приближение дислокации в полупространстве, энергия этой дислокации полагается зависящей от расстояния до ближайшей свободной поверхности, параллельной линии дислокации (рис. 2). Величины  $W_s$ ,  $W_\gamma$  и  $A$ , в свою очередь, рассчитываются по формулам [7]:

$$W_s = \gamma_s s,$$

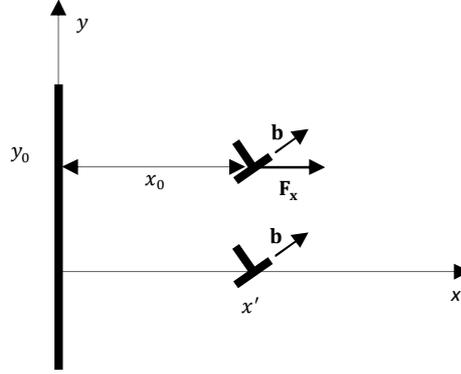
$$W_\gamma = \frac{\gamma_{gsf}(s)x}{\cos \alpha},$$

$$A = \frac{\tau s x}{\cos \alpha},$$

где  $\gamma_s$  - удельная поверхностная энергия материала,  $\gamma_{gsf}$  - удельная энергия обобщенного дефекта упаковки, зависящая от  $s$ .

Энергия  $W_{int}^{i-j}$  парного взаимодействия дислокаций рассчитывается по стандартной методике [15] как работа по зарождению одной дислокации в поле напряжений другой:

$$W_{int} = -A = - \int_0^{x_0} F_x dx .$$



**Рис. 2а.** Иллюстрация обозначений, используемых в расчете энергии парного взаимодействия.

Используя формулу Пича-Келлера:

$$F_x = -\varepsilon_{ijk}\xi_i\sigma_{jl}b_l , \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 (x, y, z),$$

где  $\varepsilon_{ijk}$  - символ Леви-Чивиты,  $\xi_i$ - проекция единичного вектора, задающего направление линии дислокации и преобразовав ее для нашего случая (см. рис.2 и 2а):  $\xi_1 = \xi_2 = 0$  ,  $\xi_3 = 1$  ,  $b_3 = 0$  , получаем:

$$F_x = b_x\sigma_{xy} + b_y\sigma_{yy} ,$$

$$W_{int} = - \int_0^{x_0} [b_x\sigma_{xy}(x, y = y_0) + b_y\sigma_{yy}(x, y = y_0)]dx.$$

Подставляя известные выражения для полей напряжений краевой дислокации у свободной поверхности [16]:

$$\sigma_{xy}(x, y)/D = b_x \left[ -\frac{x_-}{r_-^2} + \frac{2x_-^3}{r_-^4} + \frac{x_-}{r_+^2} + \frac{2x_+(x'^2+6x'x-x^2)}{r_+^4} - \frac{16xx'x_+^3}{r_+^6} \right] + b_y \left[ -\frac{y}{r_-^2} + \frac{2yx_-^2}{r_-^4} + \frac{y}{r_+^2} - \frac{2y(x'^2+4x'x+x^2)}{r_+^4} + \frac{16yxx'x_+^2}{r_+^6} \right] ,$$

$$\sigma_{yy}(x, y)/D = b_x \left[ -\frac{y}{r_-^2} + \frac{2yx_-^2}{r_-^4} + \frac{y}{r_+^2} + \frac{2y(3x'^2 + 4x'x - x^2)}{r_+^4} - \frac{16yxx'x_+^2}{r_+^6} \right] +$$

$$b_y \left[ -\frac{3x_-}{r_-^2} - \frac{2x_-^3}{r_-^4} - \frac{3x_+ + 5x'}{r_+^2} + \frac{2x_+(3x'^2 + 10x'x + x^2)}{r_+^4} - \frac{16xx'x_+^3}{r_+^6} \right],$$

где  $x_{\pm} = x \pm x'$ ,  $r_{\pm} = \sqrt{x_{\pm}^2 + y^2}$ , находим следующее выражение для  $W_{int}^{i-j}$ :

$$W_{int}^{i-j} = \frac{DS^2}{2} \left\{ \frac{4x^{*2}[-4x^{*2} + (y_j - y_i)^2]}{[4x^{*2} + (y_j - y_i)^2]^2} + \ln\left(1 + \frac{4x^{*2}}{(y_j - y_i)^2}\right) \right\},$$

где  $y_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) - координаты дислокаций (см. рис. 2).

В нашем случае дислокации образуют регулярную структуру с одинаковым расстоянием  $h$  между всеми дислокациями (см. рис. 1 и 2). В системе координат на рисунке 2, очевидно,  $y_i = (i - 1)h$ . Выражение найдено для краевых дислокаций с одинаковым вектором Бюргерса  $s$ , ориентированным под углом  $45^\circ$  к свободной поверхности (рис. 2). Параметр  $x^* = \min(x, d - x)$  означает, что, как и в случае с формулой для энергии дислокации  $W_d$ , мы полагаем энергию взаимодействия зависящей от расстояния до ближайшей свободной поверхности. Таким образом, получаем окончательное выражение для изменения энергии в виде:

$$\Delta W(x, s) = N \left( \frac{DS^2}{2} \left( \ln \frac{x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}}}{s} + 1 \right) + \frac{\gamma_{gsf}(s) \left( x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}} \right)}{\cos \alpha} - \frac{\tau s \left( x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}} \right)}{\cos \alpha} + \gamma_s s \right) +$$

$$\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{DS^2}{2} \left\{ \frac{4x^{*2}[-4x^{*2} + (y_j - y_i)^2]}{[4x^{*2} + (y_j - y_i)^2]^2} + \ln\left(1 + \frac{4x^{*2}}{(y_j - y_i)^2}\right) \right\}.$$

Параметр  $x$  в выражении изменяется в пределах от  $b$  до  $d - b$ . Найденная формула, очевидно, является приближенной. Корректность используемого приближения подробно обсуждалась в работе [7], согласно которой его точность удовлетворительна.

### §3. Полученный результат.

Изменение энергии  $\Delta W(x, s)$  в общем случае характеризует зарождение и эволюцию ансамбля нановозмущений. В частном же случае, при  $s = b$ , формула описывает классическое зарождение и скольжение решеточных частичных дислокаций. Т.е. анализ выражения для  $\Delta W(x, s)$  позволяет одновременно описывать как новый (через нановозмущения), так и классический (дислокационное скольжение) режимы деформации. Также не представляет труда провести сравнение с результатами работы [7], которые являются частным случаем (реализующимся при  $N=1$ ) предложенной в настоящей работе модели. Ниже мы провели такой анализ на примере нанопроволоки из золота (Au).

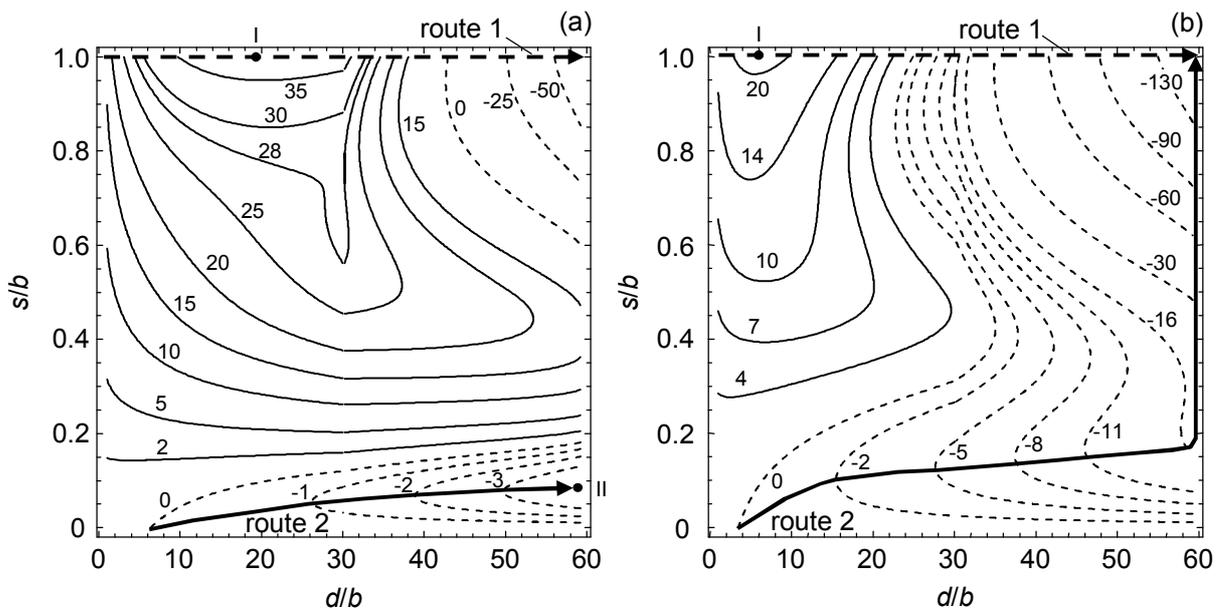
Для Au типичны следующие значения параметров:  $G=27$  ГПа,  $\nu = 0.44$ ,  $\gamma_s = 1.48$  Дж/м<sup>2</sup>,  $b=0.166$  нм [17], а энергия обобщенного дефекта упаковки  $\gamma_{gsf}(s)$  в Au была получена компьютерным моделированием [18] и может быть аппроксимирована следующим образом:

$$\gamma_{gsf}(s) = \begin{cases} \frac{\gamma_m}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi s}{b}\right), & 0 \leq s/b < \frac{1}{2} \\ \frac{\gamma_m + \gamma_s}{2} - \frac{\gamma_m - \gamma_0}{2} \cos \frac{2\pi s}{b}, & \frac{1}{2} \leq s/b < 1. \end{cases}$$

Здесь  $\gamma_m$  и  $\gamma_0$  - максимальное и минимальное значения  $\gamma_{gsf}(s)$ , соответствующие нестабильному и стабильному состояниям обобщенного дефекта упаковки.

Для Au эти величины равны:  $\gamma_m \approx 0.09$  Дж/м<sup>2</sup>,  $\gamma_0 \approx 0.031$  Дж/м<sup>2</sup> [18].

Используя вышеприведенные значения параметров мы рассчитали карты (двухмерные графики) изменения энергии  $\Delta W(x, s)$  для разных значений параметров задачи. Так на рис. 3 показаны типичные карты, рассчитанные для следующих значений параметров:  $d=10$  нм,  $h=10b$ ,  $\tau=1$  ГПа (рис. 3а) и  $\tau=1.8$  ГПа (рис. 3б). Эти графики позволяют проанализировать эволюцию системы в пространстве параметров  $(x, s)$  как для нового, так и для классического режимов деформации.



**Рис. 8.** Карты изменения энергии  $\Delta W(x, s)$ , рассчитанные для следующих значений параметров:  $d = 10$  нм,  $h = 5b$ ,  $\tau = 1$  ГПа (а),  $\tau = 1.8$  ГПа (б). Числа у линий обозначают уровни энергии  $\Delta W$  в единицах  $Db^2$ .

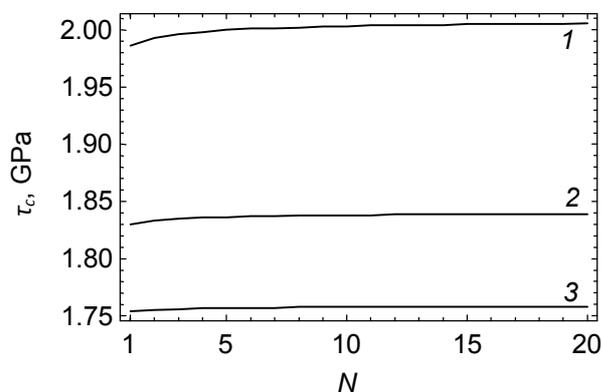
В рамках модели финальное состояние деформированной нанопроволоки задается парой параметров ( $x = d - b$ ,  $s = b$ ) и соответствует верхнему правому углу карт энергии (рис. 3). Классический режим деформации показан пунктирной стрелкой (route 1) на рис. 3. Характерной особенностью этого режима является наличие энергетического барьера (точка I), который слабо зависит от приложенного напряжения, поскольку, в основном, определяется зарождением ступенек на свободной поверхности. Т.е. классический дислокационный механизм является термически активируемым. Аналогично работе [7] ограничились приближением нулевой температуры. Тогда классический механизм деформации становится невозможным (из-за наличия энергетического барьера), и единственным возможным вариантом эволюции системы становится путь, обозначенный сплошной стрелкой (route 2) на рис. 3, который соответствует режиму деформации путем коллективного зарождения и роста ансамбля нановозмущений.

При сравнительно невысоких напряжениях (рис. 3а) система эволюционирует и достигает некоторого состояния с минимальной энергией (точка II на рис. 3а), однако система не способна достичь конечного состояния с  $x = d - b$  и  $s = b$  (точно также как и при классическом дислокационном скольжении). По достижении некоторого критического значения напряжения это становится возможным (рис. 3б), и механизм деформации становится безбарьерным.

Таким образом, в приближении нулевой температуры, система будет эволюционировать исключительно путем зарождения нановозмущений.

#### §4. Анализ результата.

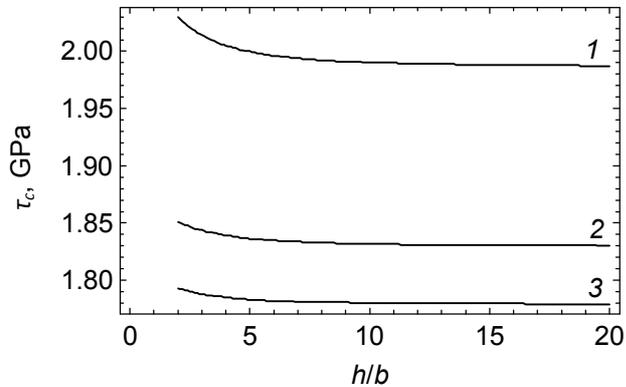
Мы рассчитали зависимости критического напряжения  $\tau_c$ , при котором происходит переход к безбарьерному зарождению и росту нановозмущений, от различных параметров задачи. Так на рис. 4 приведены зависимости  $\tau_c(N)$ , рассчитанные для значений  $d=5, 10$  и  $20$  нм (кривые 1, 2 и 3, соответственно) и  $h = 5b$ . Из этого рисунка следует, что, вообще говоря, зарождение одиночного нановозмущения выгоднее, чем зарождение ансамбля из  $N > 1$  нановозмущений (рис. 1), т.к. напряжение  $\tau_c$  для  $N = 1$  всегда ниже. Однако нетрудно видеть, что разница весьма незначительна: если сравнивать  $N = 1$  случаи и  $N = 10$  (при котором зависимость  $\tau_c(N)$  практически выходит на насыщение), то разница в соответствующих критических напряжениях  $< 1\%$ . Т.е. на практике следует ожидать, что коллективное зарождение нановозмущений (рис. 1) фактически равноправно с зарождением одиночных возмущений (см. работу [7]).



**Рис. 4.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от количества нановозмущений  $N$ , рассчитанные для  $d=5, 10$  и  $20$  нм (кривые 1, 2 и 3, соответственно).

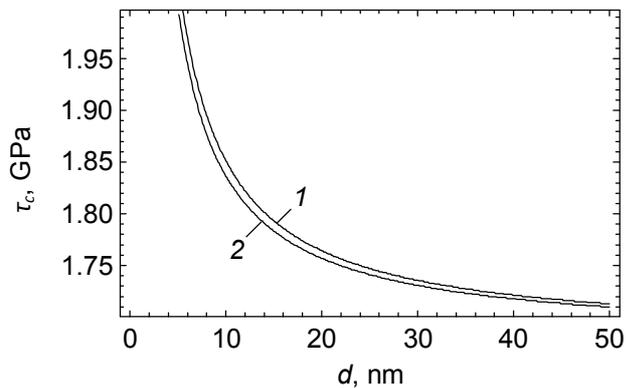
Для полноты картины мы также рассчитали зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от периода  $h$  дислокационной структуры (рис. 5) и размера  $d$  сечения нанопроволоки (рис. 6).

Зависимость  $\tau_c(h)$ , рассчитанная для  $d=5, 10$  и  $20$  нм (кривые 1, 2 и 3 соответственно на рис. 5) и  $N = 5$ , иллюстрирует, по сути, тот же факт, что и зависимость  $\tau_c(N)$  (рис. 4), а именно: взаимодействие между дислокациями оказывает очень слабое влияние на  $\tau_c$ .



**Рис. 5.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от периода  $h$  дислокационной структуры, рассчитанные для  $N = 5$  и  $d=5, 10$  и  $20$  нм (кривые 1, 2, 3 соответственно).

Зависимость же  $\tau_c(d)$ , рассчитанная для  $h = 5b, 10b$  (кривые 1, 2 соответственно на рис. 6) и  $N = 5$ , демонстрирует стандартную тенденцию к увеличению прочности нанопроволоки с уменьшением ее размера  $d$ .



**Рис. 6.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от размера сечения нанопроволоки от размера  $d$ , рассчитанные для  $h = 2b, 5b$  (кривые 1, 2 соответственно).

## Глава 3. Модель ступенчатой структуры.

### §1. Постановка задачи.

Рассмотрим теперь процесс пластической деформации в монокристаллической нанопроволоке, имеющей форму вытянутого параллелепипеда с квадратным сечением  $d \times d$ , когда нановозмущения образуют ступенчатую структуру. В данном случае вместо синхронного зарождения  $N$  абсолютно одинаковых (как по длине, так и по величине  $s$ ) нановозмущений, ситуация, когда также одинаковые нановозмущения зарождаются последовательно на свободной поверхности и растут под углом  $45^\circ$  к сечению проволоки и затем в определенный момент трансформируются в решеточные частичные дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , образуя наклоненную дислокационную стенку. При этом количество дислокаций, содержащихся в стенке, увеличивается с расстоянием, которое прошла первая дислокация (первое зародившееся нановозмущение).

Нановозмущения образуются с одинаковым шагом, соответственно дислокации, состоящие в стенке, отстоят на одинаковом расстоянии друг от друга (см. рис. 7). Количество образующихся нановозмущений зависит от периода дислокационной стенки, таким образом, чем меньше период, тем больше зарождаются нановозмущений, то есть количество нановозмущений  $N$  есть функция координаты первой дислокации  $x$ :  $N = \left[ \frac{(x-b)\sqrt{2}}{h} + 1 \right]$ , где [...] - целая часть числа, а  $h$  - период стенки. (От текущей координаты также необходимо отнять величину вектора Бюргерса, чтобы избежать ситуации, когда дислокация оказывается на расстоянии до свободной поверхности меньшем величины вектора Бюргерса.) В рамках рассматриваемой модели существующие энергетические характеристики не позволяют рассчитать движение дислокаций через всю нанопроволоку, поэтому мы ограничились случаем, когда дислокации заполняют проволоку наполовину (см. рис. 7 (b)), то есть первая дислокация прошла до середины нанопроволоки.

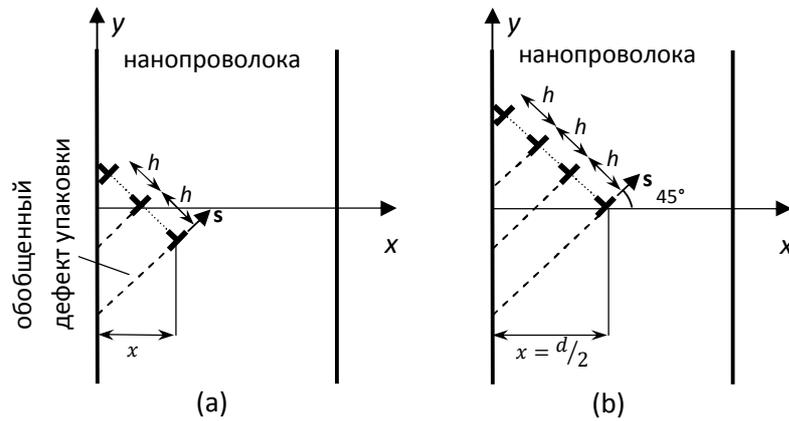
## §2. Расчет энергетических характеристик.

Подобно предыдущему случаю, мы рассчитали изменение энергии  $\Delta W$  системы, связанное с формированием ансамбля из  $N$  нановозмущений в нанопроволоке. В рамках этой модели также считается, что пластический сдвиг происходит в плоскости, наклоненной под углом  $45^\circ$  к основанию нанопроволоки, под действием сдвигового напряжения  $\tau$ , действующего в этой плоскости. Нанопроволока предполагается упругоизотропным телом, характеризующимся модулем сдвига  $G$  и коэффициентом Пуассона  $\nu$  и находящимся под действием приложенного постоянного растягивающего напряжения. Изменение энергии  $\Delta W$ , представляющее собой разницу энергий нанопроволоки с нановозмущениями и исходной бездефектной нанопроволоки, представим в виде:

$$\Delta W = \sum_{i=1}^N (W_d + W_s + W_\gamma - A) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N W_{int}^{i-j},$$

где  $W_d$  - собственная энергия дислокации,  $W_s$  - энергия ступеньки, образующейся на свободной поверхности при зарождении дислокации,  $W_\gamma$  - энергия обобщенного дефекта упаковки,  $A$  - работа напряжения  $\tau$  по перемещению дислокации,  $W_{int}^{i-j}$  - энергия парного взаимодействия двух краевых дислокаций.

Описанные отличия рассматриваемой модели вносят изменения, характеризующиеся тем, что все дислокации находятся на разных расстояниях от свободной поверхности. Эти изменения влияют на расчет собственной энергии дислокации  $W_d$ , энергии обобщенного эффекта упаковки  $W_\gamma$  и энергии парного взаимодействия дислокаций  $W_{int}^{i-j}$ .



**Рис. 7.** Модельная конфигурация дислокаций. (а) Ансамбль нановозмущений зарождается и растет. Вектор Бюргерса  $s$  постепенно возрастает от 0 до  $b$ , обобщенные дефекты упаковки эволюционируют параллельно с ростом  $s$ . Нановозмущения трансформируются в стандартные частичные решеточные дислокации (когда  $s$  достигает величины  $b$ ). (б)-конечная конфигурация. Первая дислокация прошла до середины нанопроволоки.

При вычислении дислокационной энергии  $W_d$  также использовалось приближение бесконечной прямолинейной краевой дислокации у свободной поверхности (в полупространстве), поскольку аналитическое выражение для энергии дислокации конечной длины в нанопроволоке квадратного сечения неизвестно. Ограничения, упомянутые выше, связаны именно с этой формулой. Для рассматриваемой модели выражение для дислокационной энергии для  $i$ -ой дислокации имеет вид:

$$W_d = \frac{Ds^2}{2} \left( \ln\left(\frac{x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}}}{s}\right) + 1 \right),$$

где  $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$ ,  $s$  – модуль вектора Бюргерса дислокации,  $x$  – расстояние от первой дислокации до свободной поверхности, на которой она зародилась,  $d$  – ширина нанопроволоки,  $h$ - период дислокационной стенки,  $i$ - номер дислокации в порядке их образования.

Обычно энергия дислокации полагается зависящей от расстояния до ближайшей свободной поверхности, но, поскольку в этой модели при движении дислокаций они заполняют проволоку по всему сечению, пришлось ограничиться расчетом случая, когда первая дислокация доходит до середины проволоки. Соответственно, не возникает конфликта, и дислокационная энергия всех дислокаций рассчитывается в зависимости от расстояния дислокации до свободной поверхности, где она зародилась.

Величина  $W_s$  подобно предыдущему случаю рассчитывается по формуле:

$$W_s = \gamma_s s,$$

где  $\gamma_s$  - удельная поверхностная энергия материала.

Выражения для  $W_\gamma$  и  $A$  с учетом изменений, вносимых новой моделью, рассчитываются по формулам:

$$W_\gamma = \frac{\gamma_{gsf}(s)(x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}})}{\cos \alpha},$$

$$A = \frac{\tau s(x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}})}{\cos \alpha},$$

где  $\gamma_{gsf}$  - удельная энергия обобщенного дефекта упаковки.

Энергия  $W_{int}^{i-j}$  парного взаимодействия дислокаций рассчитывается по стандартной методике [15] как работа по зарождению одной дислокации в поле напряжений другой. Используя выражение, полученное для предыдущей модели, скорректировав его для случая, когда дислокации находятся на разных расстояниях от свободной поверхности, получили следующее выражение:

$$W_{int}^{i-j} = \frac{1}{2} s^2 D \left\{ - \frac{4x_j x_i (x_j^2 - x_i^2 - 2x_j(y_j - y_i) - (y_j - y_i)^2)(x_j^2 - x_i^2 - 2x_i(y_j - y_i) + (y_j - y_i)^2)}{((x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2)((x_j + x_i)^2 + (y_j - y_i)^2)} + \ln\left(1 + \frac{4x_j x_i}{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}\right) \right\}.$$

Здесь  $x_i$ ,  $x_j$ ,  $y_i$  и  $y_j$  – координаты соответственно по  $x$  и  $y$  дислокаций с номерами  $i$  и  $j$  ( $i, j = 1 \dots N$ ).

В системе координат рисунка несложно получить следующие выражения для координат  $x_i$ ,  $x_j$  и  $\Delta y = y_j - y_i$  через период дислокационной стенки  $h$ :

$$x_i = x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}}, \quad x_j = x - \frac{(j-1)h}{\sqrt{2}}, \quad \Delta y = \frac{(j-i)h}{\sqrt{2}}.$$

После подстановки этих выражений, получаем новое представление для энергии  $W_{int}^{i-j}$ :

$$W_{int}^{i-j} = \frac{1}{2} s^2 D \left\{ - \frac{(\sqrt{2}h(-1+i)-2x)(\sqrt{2}h(-1+j)-2x)(h(-2+i+j)-2\sqrt{2}x)^2}{(h^2(2+(-2+i)i+(-2+j)j)-2\sqrt{2}h(-2+i+j)x+4x^2)^2} + \ln \frac{h^2(2+(-2+i)i+(-2+j)j)-2\sqrt{2}h(-2+i+j)x+4x^2}{h^2(i-j)^2} \right\}.$$

После подстановки полученного выражения в формулу для  $\Delta W$ , получили окончательное выражение для изменения энергии системы:

$$\Delta W(x, s) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{Ds^2}{2} \left( \ln \frac{x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}}}{s} + 1 \right) + \frac{\gamma_{gsf}(s) \left( x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}} \right)}{\cos \alpha} - \frac{\tau s \left( x - \frac{(i-1)h}{\sqrt{2}} \right)}{\cos \alpha} + \right. \\ \left. j=i+1 N 12 s 2 D - 2 h - 1 + i - 2 x 2 h - 1 + j - 2 x h - 2 + i + j - 2 2 x 2 h 2 2 + - 2 + i i + - 2 + j j - 2 2 h - 2 + i + j x + 4 x 2 2 + \ln h 2 2 + - 2 + i i + - 2 + j j - 2 2 h - 2 + i + j x + 4 x 2 h 2 i - j 2 \right] + N \gamma_s s .$$

Как упоминалось ранее, эта модель позволяет описать поведение системы при движении первой дислокации до середины нанопроволоки, следовательно, параметр  $x$  меняется от  $b$  до  $d/2$ .

Как и в предыдущем случае, мы провели анализ полученного выражения на примере нанопроволоки из золота (Au) и сравнили на этот раз с результатами, полученными в работе [7] и результатами предыдущего случая.

### §3. Полученный результат.

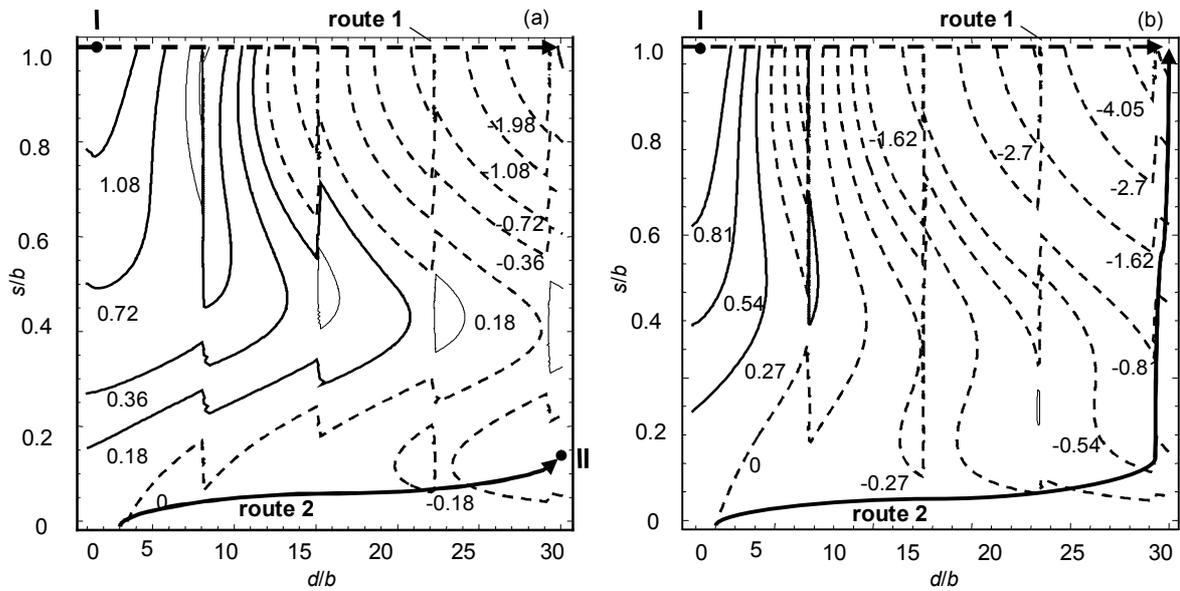
Напомним, что для Au типичны следующие значения параметров:  $G=27$  ГПа,  $\nu = 0.44$ ,  $\gamma_s = 1.48$  Дж/м<sup>2</sup>,  $b=0.166$  нм [17], а энергия обобщенного дефекта упаковки  $\gamma_{gsf}(s)$  в Au была получена компьютерным моделированием [18] и может быть аппроксимирована следующим образом:

$$\gamma_{gsf}(s) = \begin{cases} \frac{\gamma_m}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi s}{b}\right), & 0 \leq s/b < \frac{1}{2} \\ \frac{\gamma_m + \gamma_s}{2} - \frac{\gamma_m - \gamma_0}{2} \cos \frac{2\pi s}{b}, & \frac{1}{2} \leq s/b < 1, \end{cases}$$

где  $\gamma_m$  и  $\gamma_0$  - максимальное и минимальное значения  $\gamma_{gsf}(s)$ , соответствующие нестабильному и стабильному состояниям обобщенного дефекта упаковки.

Для Au эти величины равны:  $\gamma_m \approx 0.09$  Дж/м<sup>2</sup>,  $\gamma_0 \approx 0.031$  Дж/м<sup>2</sup> [18].

Используя вышеприведенные значения параметров, мы, подобно предыдущему случаю, рассчитали карты изменения энергии  $\Delta W(x, s)$  для разных значений параметров задачи. Ниже показаны карты  $\Delta W(x, s)$ , рассчитанные для следующих значений параметров:  $d=10$  нм,  $h=10b$ ,  $\tau = 1.8$  ГПа (рис. 8а),  $\tau = 2.5$  ГПа (рис. 8б).



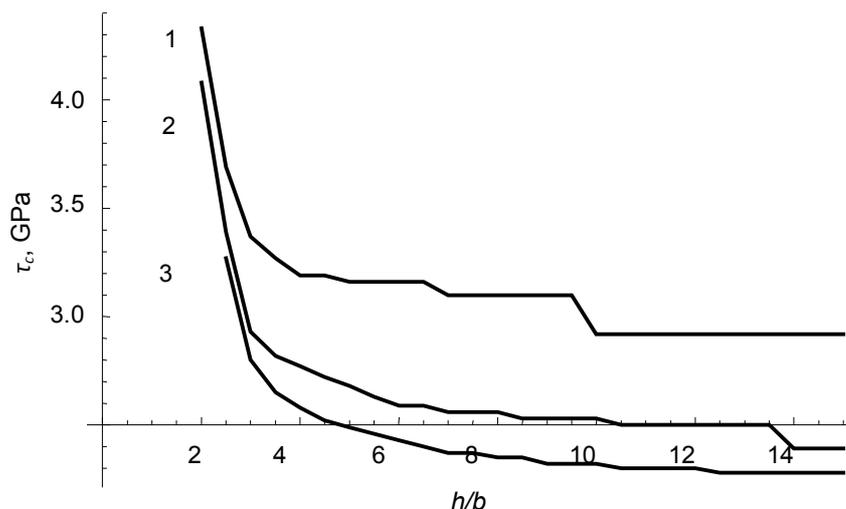
**Рис. 8.** Карты изменения энергии  $\Delta W(x, s)$ , рассчитанные для следующих значений параметров:  $d = 10$  нм,  $h = 10b$ ,  $\tau = 1.8$  ГПа (а),  $\tau = 2.5$  ГПа (б). Числа у линий обозначают уровни энергии  $\Delta W$  в единицах  $Db^2$ .

В рамках модели финальное состояние деформированной нанопроволоки задается парой параметров ( $x = d/2$ ,  $s = b$ ) и соответствует верхнему правому углу карт энергии (рис. 8). Классический режим деформации показан пунктирной стрелкой (route 1) на рис. 8. Как и в предыдущем случае, в этом режиме присутствует энергетический барьер (точка I), который слабо зависит от приложенного напряжения, поскольку, в основном, определяется зарождением ступенек на свободной поверхности. Т.е. классический дислокационный механизм является термически активируемым. Аналогично случаю, рассмотренному ранее и работе [7] ограничимся приближением нулевой температуры. Тогда классический механизм деформации становится невозможным (из-за наличия энергетического барьера), и единственным возможным вариантом эволюции системы становится путь, обозначенный сплошной стрелкой (route 2) на рис. 8а, который соответствует режиму деформации путем последовательного зарождения и роста нановозмущений.

При напряжениях характерных для безбарьерного пути деформирования предыдущей модели ( $\tau = 1.8$  ГПа) система эволюционирует и достигает некоторого состояния с минимальной энергией (точка II на рис. 8a), однако система не способна достичь конечного состояния с  $x = d/2$  и  $s = b$  (точно также как и при классическом дислокационном скольжении). По достижении некоторого критического значения ( $\tau = 2.5$  ГПа) напряжения это становится возможным (рис. 8b) и механизм деформации становится безбарьерным.

#### §4. Анализ результата.

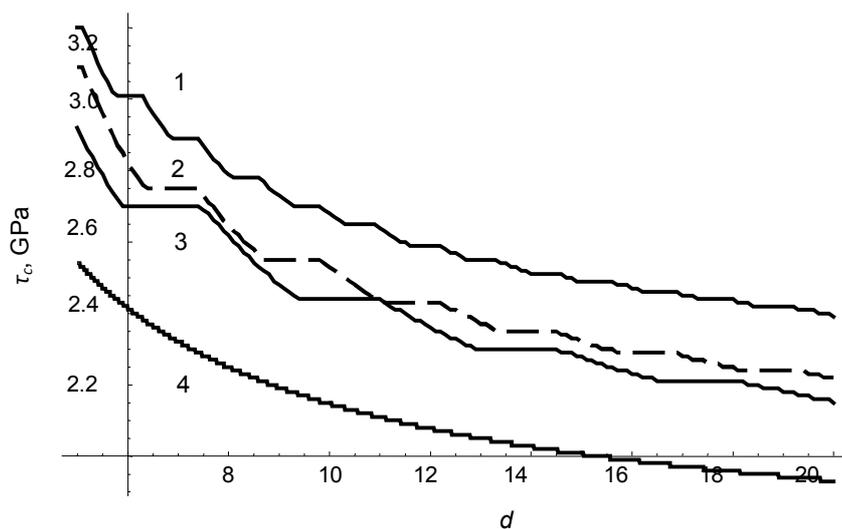
Мы рассчитали зависимости критического напряжения  $\tau_c$ , при котором происходит переход к безбарьерному зарождению и росту нановозмущений, от различных параметров задачи. Так на рис.9 приведены зависимости  $\tau_c(h)$  от периода дислокационной стенки  $h$ , рассчитанные для значений  $d= 5, 10$  и  $20$  нм (кривые 1, 2 и 3, соответственно).



**Рис. 9.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от периода дислокационной стенки, рассчитанные для  $d= 5, 10$  и  $20$  нм (кривые 1, 2 и 3, соответственно).

Из этого рисунка видно, что подобно результатам исследования предыдущей модели величина критического напряжения  $\tau_c$  уменьшается с увеличением характерных размеров проволоки и заметно понижается с ростом периода дислокационной структуры. Однако предположение, что коллективное последовательное зарождение нановозмущений, образующее ступенчатую структуру, может быть энергетически выгоднее зарождения одиночного нановозмущения или ансамбля нановозмущений, рассмотренного ранее, не подтвердилось.

Мы также рассчитали зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от размера  $d$  сечения нанопроволоки (рис. 10) для  $h = 5b, 10b, 15$  (кривые соответственно 1, 2, 3 на рис. 10).



**Рис. 10.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  от размера сечения нанопроволоки от размера  $d$ , рассчитанные для  $h = 5b, 10b, 15b$  (кривые 1, 2, 3 соответственно). Кривая 4 отражает зависимость для случая, рассмотренного в работе [7], то есть для случая движения одиночной дислокации ( $N=1$ ).

Они демонстрируют стандартную тенденцию к увеличению прочности нанопроволоки с уменьшением ее размера  $d$ . Также этот график подтверждает утверждение о том, что механизм ступенчатого движения дислокаций менее вероятен, чем движение одиночной дислокации, рассмотренное в статье [7].

## Выводы.

Расчет критического напряжения, при котором механизм синхронного зарождения нановозмущений становится безбарьерным, и его сравнение с рассмотренным ранее случаем зарождения одиночного нановозмущения [7] свидетельствуют о том, что оба варианта практически равноправны. Разница в соответствующих критических напряжениях, при которых оба механизма становятся безбарьерными, составляет менее 1%.

С другой стороны, наше изначальное предположение, что коллективное зарождение нановозмущений может быть энергетически выгоднее одиночного за счет взаимного экранирования дислокационных полей напряжений, не подтвердилось. Фактически дислокационное взаимодействие оказывает слабое влияние на процесс деформации нанопроволоки.

Рассмотрение механизма последовательного зарождения нановозмущений показало, что этот механизм маловероятен. Критические напряжения, при которых он становится безбарьерным, заметно выше, следовательно, вероятность, что деформация пойдет путем последовательного зарождения ансамбля нановозмущений меньше, и механизм зарождения одиночного возмущения и синхронного зарождения нановозмущений предпочтительней.

В реальной нанопроволоке при наличии отклонений от идеальной модельной конфигурации, используемой здесь для расчета, можно ожидать, что в определенных ситуациях (например, наличие ступенек в исходной недеформированной нанопроволоке, изменяющийся размер сечения по ее длине и т. п.) незначительное преимущество зарождения одиночного нановозмущения ( $N = 1$ ) может нивелироваться в пользу коллективного зарождения.

Таким образом, можно ожидать, что Au нанопроволоки способны деформироваться как путем зарождения и роста одиночных нановозмущений [7], так и посредством синхронного или последовательного формирования целых ансамблей нановозмущений.

## Список литературы.

- [1] M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, J.N. Florando, W.D. Nix. Sample Dimensions Influence Strength and Crystal Plasticity // *Science*. 2004. V.305, paper 5686. P. 986- 989.
- [2] J.R. Greer, W.D. Nix. Nanoscale gold pillars strengthened through dislocation starvation // *Phys. Rev. B*. 2006. V.73, paper 245410.
- [3] J.R. Greer. Bridging the gap between computational and experimental length scales a review on nanoscale plasticity // *Rev. Adv. Mater. Sci*. 2006. V.13, Is.1. P.59-70.
- [4] S. Brinckmann, Ju-Young Kim, J.R. Greer. Fundamental Differences in Mechanical Behavior between Two Types of Crystals at the Nanoscale // *Phys. Rev. Lett.*2008.V.100, paper 155502.
- [5] E. Rabkin, D.J. Srolovitz. Onset of plasticity in gold nanopillar compression // *Nano Lett.*2007.V.7, №1. P.101-107.
- [6] T.Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall. Temperature and Strain-Rate Dependence of Surface Dislocation Nucleation // *Phys. Rev. Lett*. 2008. V.100, paper 025502.
- [7] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances in Deformed Nanowires // *Phys. Rev. Lett*. 2009. V.103, paper 135501.
- [8] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances and nanoscale deformation twins in fcc nanowires // *Phys. Rev. B*. 2011.V.83, paper 054111.
- [9] M.Yu Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko. Nanodisturbances in deformed Gum Metal // *Acta Mater*. 2009. V.54, paper 2489.
- [10] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Special mechanism for dislocation nucleation in nanomaterials // *Appl. Phys. Lett*. 2006. V.88, paper 211901.
- [11] M.Yu Gutkin, I.A. Ovid'ko. Homogeneous nucleation of dislocation loops in nanocrystalline metals and ceramics // *Acta Mater*. 2008. V.56, №7. P.1642-1649.

- [12] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.J. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang. Reversible Movement of Homogenously Nucleated Dislocations in a  $\beta$ -Titanium Alloy // Phys. Rev. Lett. 2009. V.102, paper 045503.
- [13] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov, E. Kaxiras. Generalized-stacking-fault energy surface and dislocation properties of aluminum // Phys. Rev. B. 2000. V.62, paper 3099.
- [14] N. Bernstein, E.B. Tadmor. Tight-binding calculations of stacking energies and twinnability in fcc metals // Phys. Rev. B. 2004. V.69, paper 094116.
- [15] T. Mura. Advances in Material Research // Ed. by H. Herman, Interscience, New York, 1968. P. 1-108.
- [16] T. Mura. Micromechanics of Defects in Solids // Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1987.
- [17] J.P. Hirth, J. Lothe. Theory of Dislocations // Wiley, New York, 1982.-435p.
- [18] H.S. Park, J.A. Zimmerman. Modeling inelasticity and failure in gold nanowires // Phys. Rev. B. 2005. V.72, paper 054106.
- [19] M. Ding, D. C. Sorescu, G. P. Kotchey, A. Star. Welding of Gold Nanoparticles on Graphitic Templates for Chemical Sensing // J. Am. Chem. Soc. 2012. V.134, №7. P.3472-3479.