

УДК 620.22

Локальные структурные трансформации в ГЦК-решетке в условиях контактного взаимодействия различного типа. Молекулярно-динамическое исследование

С.Г. Псахье^{1,2,3}, К.П. Зольников¹, А.И. Дмитриев^{1,2}, Д.С. Крыжевич¹, А.Ю. Никонов¹

¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634021, Россия

² Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, 634050, Россия

³ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, 634050, Россия

В работе изучены особенности развития локальных структурных изменений в кристаллите меди на атомном уровне при различных типах контактного взаимодействия: сдвиговое нагружение идеально сопряженных поверхностей, локальное сдвиговое нагружение и наноиндентирование. Исследование выполнено на основе молекулярно-динамического подхода. Межатомное взаимодействие описано в рамках метода погруженного атома. Показано, что первоначально аккомодация нагружаемого кристаллита осуществляется посредством генерации локальных структурных трансформаций, которые впоследствии формируют дефекты более высокого ранга, такие как дислокации, дефекты упаковки, границы раздела и т.д. Дальнейшее развитие пластической деформации характеризуется распространением дефектов структуры из зоны контакта в объем кристаллита. Выход дефектов структуры на свободную поверхность ведет к формоизменению моделируемого кристаллита. В зависимости от условий нагружения эволюция деформационной картины может характеризоваться изменением кристаллографической ориентации кристаллита вблизи зоны контакта, а также образованием разориентированных наноразмерных областей и, в конечном итоге, формированием устойчивого наноструктурного состояния. Полученные результаты позволяют с новых позиций понять природу генерации дефектов кристаллической структуры при зарождении и развитии пластической деформации в нагружаемых материалах.

Ключевые слова: локальные структурные трансформации, контактное взаимодействие, наноиндентирование, молекулярная динамика, пластическая деформация

Local structural transformations in the fcc lattice in various contact interaction. Molecular dynamics study

S.G. Psakhie^{1,2,3}, K.P. Zolnikov¹, A.I. Dmitriev^{1,2}, D.S. Kryzhevich¹ and A. Yu. Nikonov¹

¹ Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, 634021, Russia

² National Research Tomsk State University, Tomsk, 634050, Russia

³ National Research Tomsk Polytechnical University, Tomsk, 634050, Russia

The work is a molecular dynamics study of the peculiarities of local structural transformations in a copper crystallite at the atomic level in contact interaction of various types: shear loading of perfectly conjugate surfaces, local shear loading and nanoindentation. Interatomic interaction is described in the framework of the embedded atom method. It is shown that initial accommodation of the loaded crystallite proceeds through local structural transformations giving rise to higher-rank defects such as dislocations, stacking faults, interfaces, etc. In further plastic deformation, the structural defects propagate from the contact zone to the crystallite bulk. The egress of structural defects to a free surface causes deformation of the model crystallite. The deformation pattern can evolve, depending on loading conditions, with a change in crystallographic orientation of the crystallite near the contact zone, generation of misoriented nano-sized regions, and eventually formation of a stable nanostructural state. The obtained results allow conceptually new understanding of the nature of defect generation in a crystalline structure during the nucleation and development of plastic deformation in loaded materials.

Keywords: local structural transformations, contact interaction, nanoindentation, molecular dynamics, plastic deformation

1. Введение

Проблемы описания поведения материала в зоне контактного взаимодействия всегда привлекали к себе

внимание механиков, материаловедов, специалистов в области физики и химии. Это обусловлено не только важностью расширения фундаментальных знаний, ка-

сающихся этой сложной междисциплинарной области, но и значимостью их практических приложений, прежде всего в различных областях машиностроения. В условиях трения в зоне контактного взаимодействия реализуются сложные процессы, включающие в себя упругую и пластическую деформацию, фазовые и структурные превращения, разрушение. Согласно развивающимся в последние годы представлениям совместное описание этих процессов требует развития многоуровневых подходов [1–3]. При этом для моделирования может быть использован метод подвижных клеточных автоматов [4–7], который позволяет в рамках единого подхода описывать поведение материала на разных масштабах — от атомного до макроскопического. В предельном случае уравнения движения этого метода переходят в уравнения движения молекулярной динамики [8, 9]. Это открывает возможности исследования элементарных атомных механизмов, реализующихся в контактной зоне и, что крайне важно, позволяет использовать полученные результаты для моделирования на более высоких масштабах, а также для интерпретации экспериментальных данных.

Известно, что контактное взаимодействие кристаллических материалов приводит к локальным изменениям их атомной структуры вблизи поверхности, что, в свою очередь, определяет течение таких сложных процессов, как пластическая деформация, генерация повреждений и механическое перемешивание, нанофрагментация, аморфизация и т.п. В работах [10, 11] показано, что процесс трения в значительной степени определяется механизмами зарождения и развития пластической деформации, реализующимися в так называемых пятнах контакта.

Исходя из вышесказанного, в настоящей работе на основе молекулярно-динамического моделирования исследуются особенности структурных изменений кристаллической решетки в зоне пятна контакта. Рассмотрены три варианта взаимодействия: сдвиговое нагружение идеально сопряженных атомных поверхностей материалов; сдвиговое нагружение в условиях локального контакта и нанондентирование.

2. Моделирование сдвигового нагружения идеально сопряженных атомных поверхностей

На первом этапе изучения особенностей зарождения и развития локальных структурных изменений, реализуемых в ГЦК-решетке при контактном взаимодействии, было рассмотрено взаимодействие двух идеально сопряженных кристаллитов Cu и Ag в условиях сдвигового нагружения. Атомные решетки кристаллитов были ориентированы таким образом, что оси X , Y и Z соответствовали кристаллографическим направлениям [100], [010] и [001] для кристаллита меди и направлениям [120], $[\bar{2}10]$ и [001] для кристаллита серебра. Схе-

матическое изображение рассматриваемой модели контакта представлено на рис. 1.

Для расчетов в рамках метода молекулярной динамики был использован программный пакет LAMMPS [12], имеющий возможность проведения параллельных вычислений. Относительное проскальзывание вдоль оси X моделировалось заданием фиксированных скоростей атомам, находящимся во внешнем граничном слое кристаллита Ag. Скорость нагружения V_x составляла 20 м/с. Компоненты скоростей V_x и V_z атомов кристаллита Cu в аналогичном внешнем граничном слое приравнялись нулю, что имитировало действие неподвижного захвата. Выбранный потенциал [13] позволяет с высокой степенью точности описывать упругие и поверхностные свойства моделируемых металлов, а также энергетические параметры дефектов, что является важным для решения поставленных в работе задач. В направлении осей X и Z задавались периодические граничные условия, а в направлении Y моделировалось сжатие с силой 0.002 нН, действующей на каждый атом в нагружаемом слое.

Для имитации отвода тепла из области контакта во внутренние слои кристаллита меди генерировался дополнительный слой атомов, в пределах которого поглощение кинетической энергии определялось заданием фиксированного значения температуры $T_{fr} = 300$ К. Положение этого слоя показано на рис. 1.

Эволюция структуры модели контакта представлена на рис. 2, из которого видно, что в процессе нагружения формируется зона контакта с нарушенным кристаллическим порядком. Этот процесс сопровождается интенсивным перемешиванием атомов, принадлежащих обоим кристаллитам.

На рис. 3 представлены функции радиального распределения атомов, построенные для конечной конфигурации модели контакта. Выделяются три различных фрагмента (рис. 2).

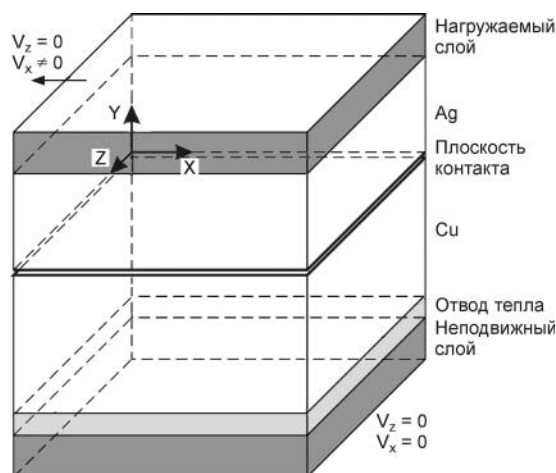


Рис. 1. Общий вид модели контакта и схема нагружения

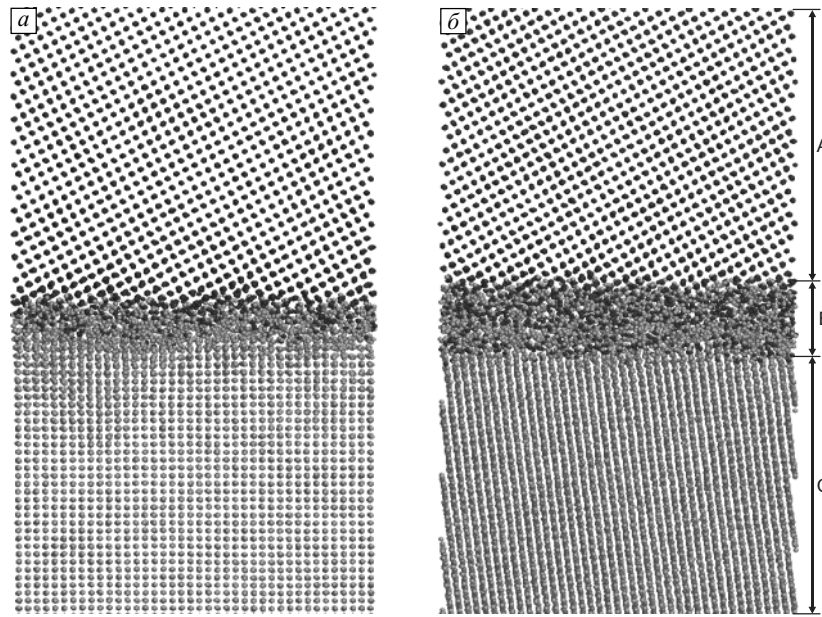


Рис. 2. Эволюция структуры моделируемых кристаллитов в случае задания отвода тепла из области контакта. Шаги интегрирования: $10^4 \Delta t$ (а) и $10^5 \Delta t$ (б)

Из сравнения начальной и конечной конфигураций атомной структуры видно, что при заданных условиях нагружения атомная решетка кристаллита меди (зона С, рис. 2, б) испытывает поворот как целое. Это подтверждает анализ пиков функции радиального распределения атомов. Некоторые отличия в положениях пиков обусловлены деформацией сжатия.

Для изучения механизма переориентации кристаллита Си как целого анализировались локальные структурные трансформации. С этой целью был использован алгоритм их идентификации, использованный в работах [14–16], в которых такие структурные трансформации были названы протодефектами. Результаты исследований показали, что, начиная с некоторой степени дефор-

мации, вблизи области контакта возникают локальные структурные трансформации. В процессе нагружения их число растет, и они формируют дефекты более высокого ранга (планарные дефекты типа дефекта упаковки), которые распространяются от границы контакта в объем материала. Как видно из рис. 4, в локальные структурные трансформации вовлекается достаточно большой объем материала, что в конечном итоге приводит к изменению кристаллографической ориентации зоны С как целого.

3. Сдвиговое нагружение кристаллита меди в условиях локального контактного взаимодействия

В зонах трения реальная шероховатость поверхностного слоя приводит к множественным элементарным актам контактного сдвигового взаимодействия. Таким образом, условия деформации в пятнах контакта всегда связаны с элементами локального сдвига. Следует ожидать, что в подобных условиях нагружения будут генерироваться локальные структурные трансформации, которые, в свою очередь, могут формировать дефекты более высокого ранга. Для детального исследования этого процесса было рассмотрено взаимодействие отдельного абсолютно жесткого «микровыступа» контртела с поверхностью моделируемого кристаллита Си. Образец был ориентирован таким образом, что кристаллографические направления [100], [010] и [001] ГЦК-решетки соответствовали осям X, Y и Z. Схематическое изображение модельного образца представлено на рис. 5.

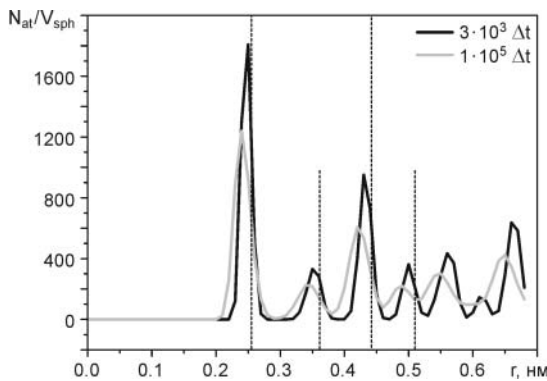


Рис. 3. Функция радиального распределения атомов в зоне С в различные моменты времени. Пунктирными линиями показаны положения координационных сфер для решетки Си при $T = 0$ К

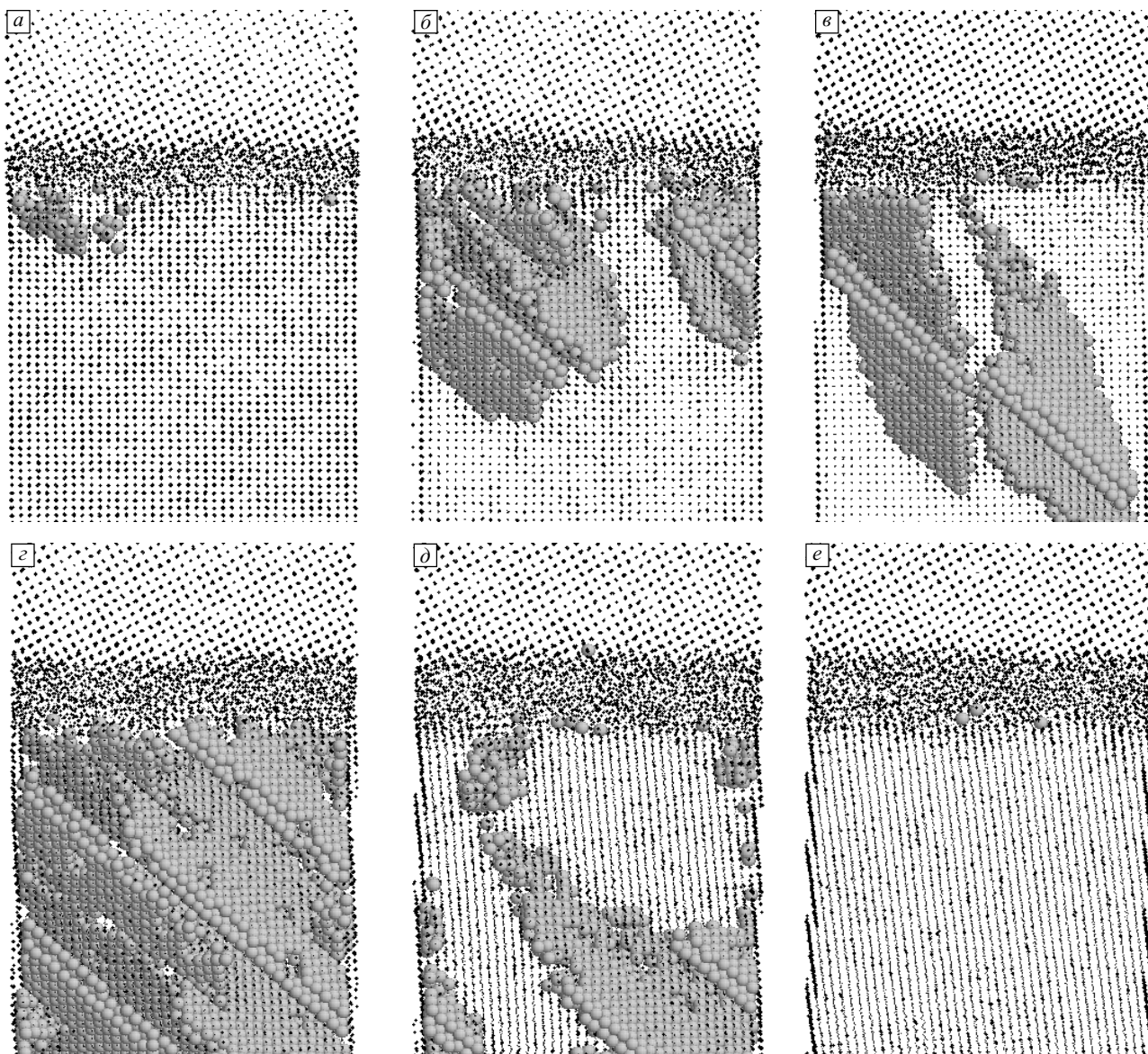


Рис. 4. Структура центрального фрагмента модели контакта на стадии зарождения и развития локальных дефектов структуры в различные моменты времени $t = 1.0 \cdot 10^4 \Delta t$ (a), $1.2 \cdot 10^4 \Delta t$ (б), $1.5 \cdot 10^4 \Delta t$ (в), $4.6 \cdot 10^4 \Delta t$ (г), $7.7 \cdot 10^4 \Delta t$ (д), $1.0 \cdot 10^5 \Delta t$ (е). Центры атомов, имеющих локальную топологию структурных связей для идеальной ГЦК-решетки, отмечены мелкими точками (бездефектные участки), для ГПУ-решетки — крупными точками

В направлении оси Z моделировались периодические граничные условия, многократно повторяющие моделируемый фрагмент и тем самым позволяющие имитировать

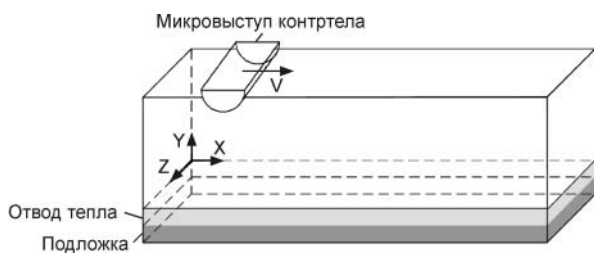


Рис. 5. Схематическое изображение модели локального контакта в условиях сдвигового нагружения

протяженность образца в заданном направлении. Остальные поверхности (вдоль X и Y) полагались свободными. Нижний слой атомов был фиксирован, имитируя подложку (рис. 5). Над слоем подложки, как и в предыдущем разделе, задавался дополнительный слой атомов, имитирующий отвод тепла. Микровыступ контртела имитировался цилиндром, ориентированным вдоль оси Z . Скорость смещения вдоль оси X была равна 10 м/с. Глубина вдавливания микровыступа в моделируемый кристаллит фиксировалась и составляла 3 нм.

Результаты моделирования показали, что при горизонтальном движении микровыступа формируется валик из атомов верхнего слоя образца (рис. 6), высота которого растет по мере движения.

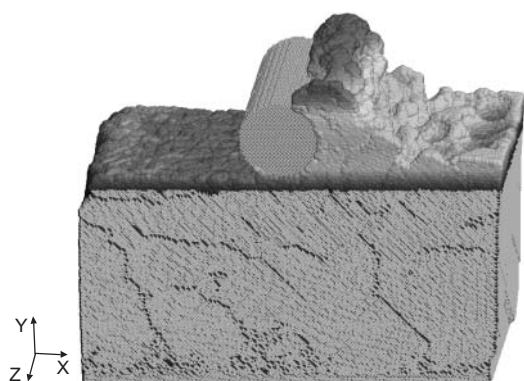


Рис. 6. Структура моделируемого кристаллита в момент времени $t = 2.5 \cdot 10^6 \Delta t$

Для анализа особенностей структурных трансформаций в процессе нагружения был выбран использованный в предыдущем разделе алгоритм идентификации локальных структурных трансформаций. Согласно полученным результатам вблизи поверхностного слоя начинают генерироваться локальные структурные трансформации. Протодефекты, в свою очередь, формируют дефекты структуры более высокого ранга, в частности частичные и полные дислокации, дефекты упаковки внедрения и вычитания и др. На рис. 7 показано изменение структуры моделируемого фрагмента, а также одного из слоев, параллельного плоскости XY , толщина которого равна параметру решетки. Хорошо видно, что в процессе движения микровыступа формирующие-

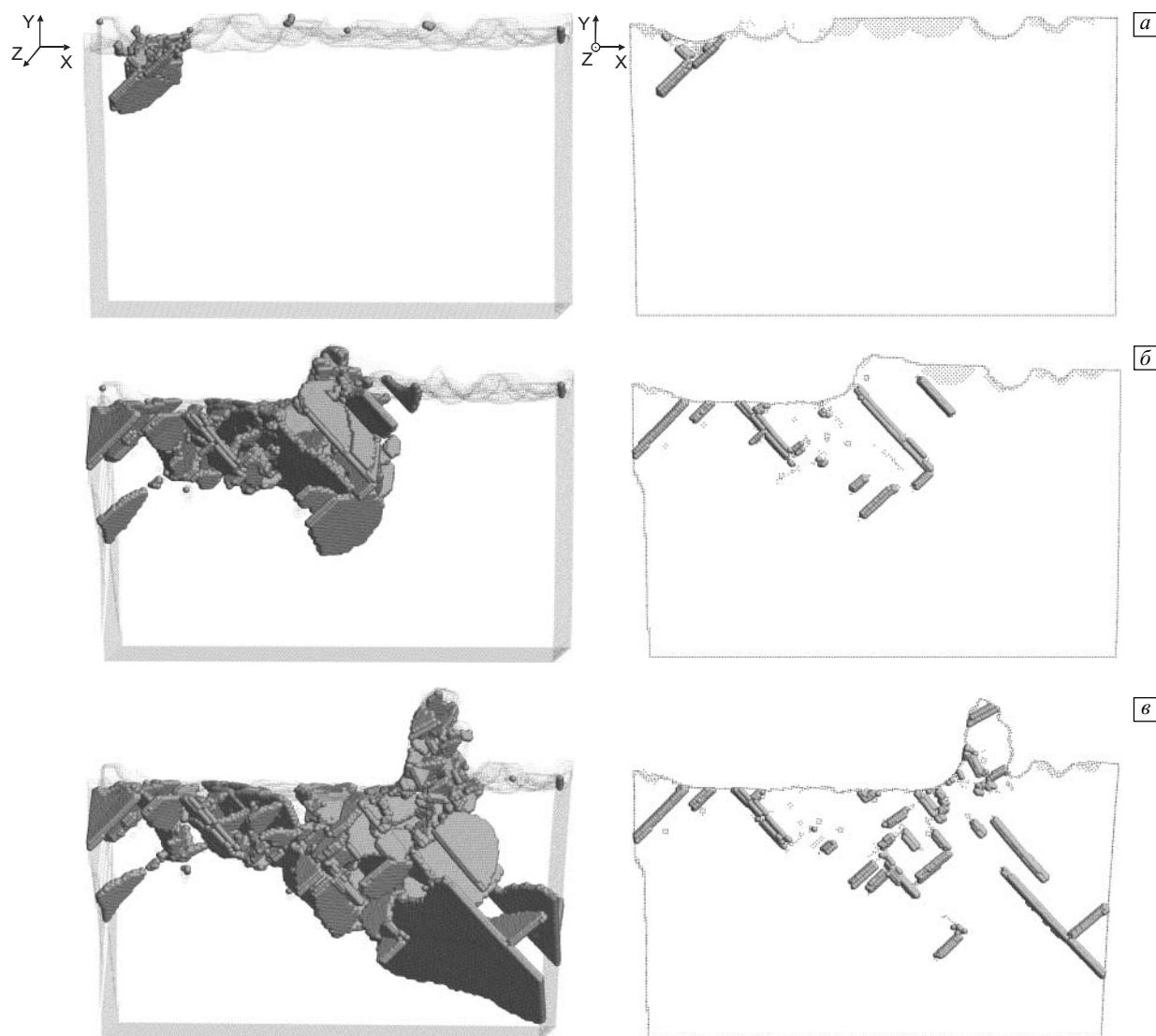


Рис. 7. Трехмерное изображение локальных структурных изменений в моделируемом кристаллите (слева) и локальные структурные изменения в узком центральном слое моделируемого кристаллита (справа) в различные моменты времени $t = 1.0 \cdot 10^6 \Delta t$ (а), $2.0 \cdot 10^6 \Delta t$ (б), $3.0 \cdot 10^6 \Delta t$ (в). Центры атомов, имеющих локальную топологию структурных связей для идеальной ГЦК-решетки, отмечены мелкими точками (бездефектные участки). Центры атомов, имеющих локальную топологию структурных связей отличную от ГЦК-решетки, отмечены крупными точками

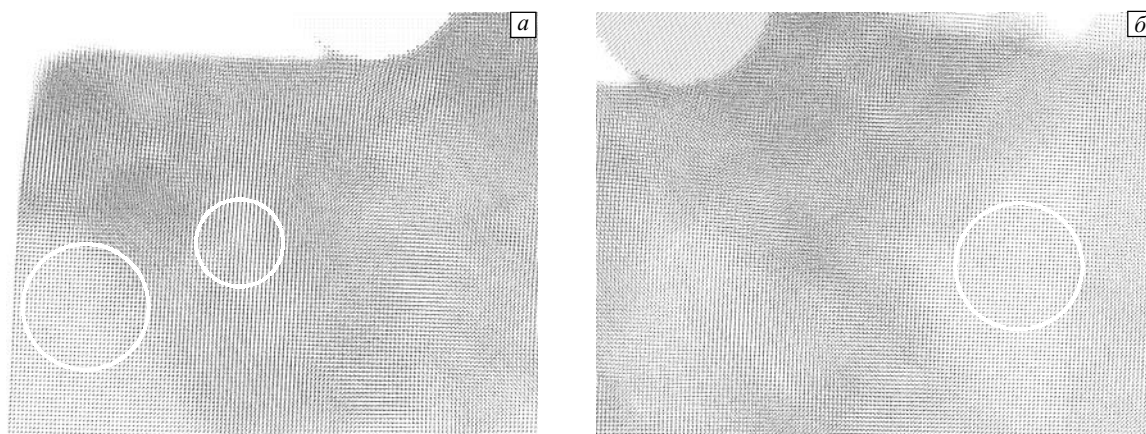


Рис. 8. Фрагмент моделируемого кристаллита в момент времени $t = 2.0 \cdot 10^6 \Delta t$. Изображения на рисунках отличаются разворотом вокруг оси OX на 2° . Вращение выполнено в лабораторной системе координат

ся дефекты упаковки «прорастают» от поверхности в объем материала.

Как отмечалось выше, генерация и распространение дефектов упаковки может приводить к переориентации исходной кристаллической решетки. В данном случае это приводит к формированию наноразмерных разориентированных областей (рис. 8). Изображения на рис. 8 отличаются разворотом анализируемого фрагмента. Хорошо видно, что если для изображения на рис. 8, *a* идеальная ГЦК-структура просматривается в левой части представленного фрагмента, то на рис. 8, *б* это справедливо для правой части фрагмента. Таким образом, в результате локального сдвигового нагружения в поверхностном слое материала возможно формирование разориентированных нанофрагментов.

4. Особенности зарождения пластической деформации при наноиндентировании

Одним из наиболее наглядных и эффективных методов изучения физико-механических свойств материалов при контактном взаимодействии является наноинденти-

рование, поскольку изменение параметров индентирования дает возможность направленно влиять на процесс зарождения и развития очага пластической деформации. Как правило, целью работ, связанных с компьютерным моделированием поведения материалов при индентировании, являются изучение механизмов пластической деформации материала в зоне индентора, визуализация дефектных структур и интерпретация кривых «нагрузка – глубина вдавливания» [17–23]. Несмотря на информативность результатов подобных исследований, из-за сложной деформационной картины анализировать полученные результаты затруднительно. Для упрощения интерпретации результатов индентирования в настоящей работе был использован протяженный индентор цилиндрической формы. Нагружение осуществлялось его боковой поверхностью (рис. 9). При этом моделируемый образец имел форму параллелепипеда. Вдоль направлений $[100]$ и $[011]$ использовались свободные граничные условия, а вдоль направления $[011]$ верхняя часть образца моделировалась как свободная поверхность, в то время как в нижней части образца положения

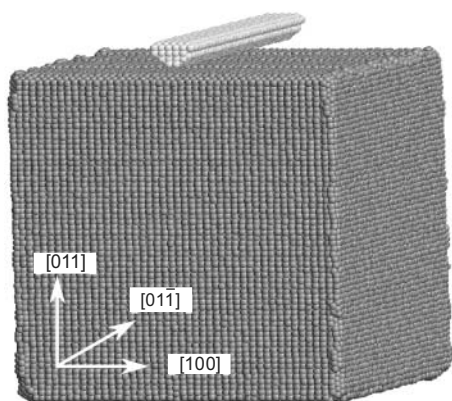


Рис. 9. Кристаллографическая ориентация моделируемой системы

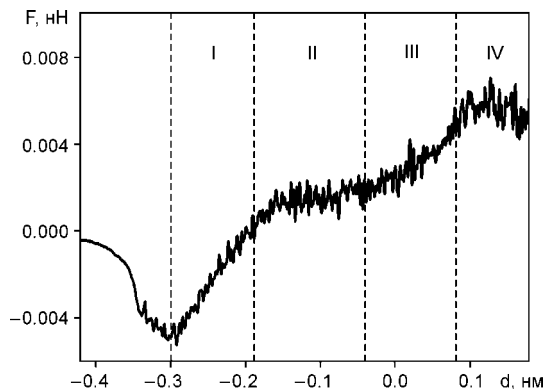


Рис. 10. Зависимость силы сопротивления от глубины вдавливания индентора

атомов вдоль направления [011] фиксировались. Скорость вдавливания индентора составляла 25 м/с. Нагружение моделируемых кристаллитов проводилось при 300 К.

Анализ изменений моделируемой структуры и классификация генерируемых дефектов проводились, как и ранее, на основе подхода, учитывающего характер взаимного расположения ближайших соседей для каждого из атомов [14].

Для оценки реакции системы на нагружение рассчитывалась сила сопротивления в зависимости от глубины вдавливания. Сила сопротивления F определялась как

суммарная сила, действующая на индентор со стороны нагружаемого кристаллита. Глубина вдавливания d вычислялась как расстояние от нижней границы поверхности индентора до уровня, соответствующего поверхности кристаллита в исходном состоянии (до нагружения). Результаты расчета зависимости силы сопротивления от глубины вдавливания приведены на рис. 10.

Отметим, что взаимодействие между индентором и кристаллитом возникает, как только расстояние между ними становится меньше радиуса обрезаемого межатомного взаимодействия. Как и в работах [17–20], первоначально между индентором и нагружаемой поверхностью

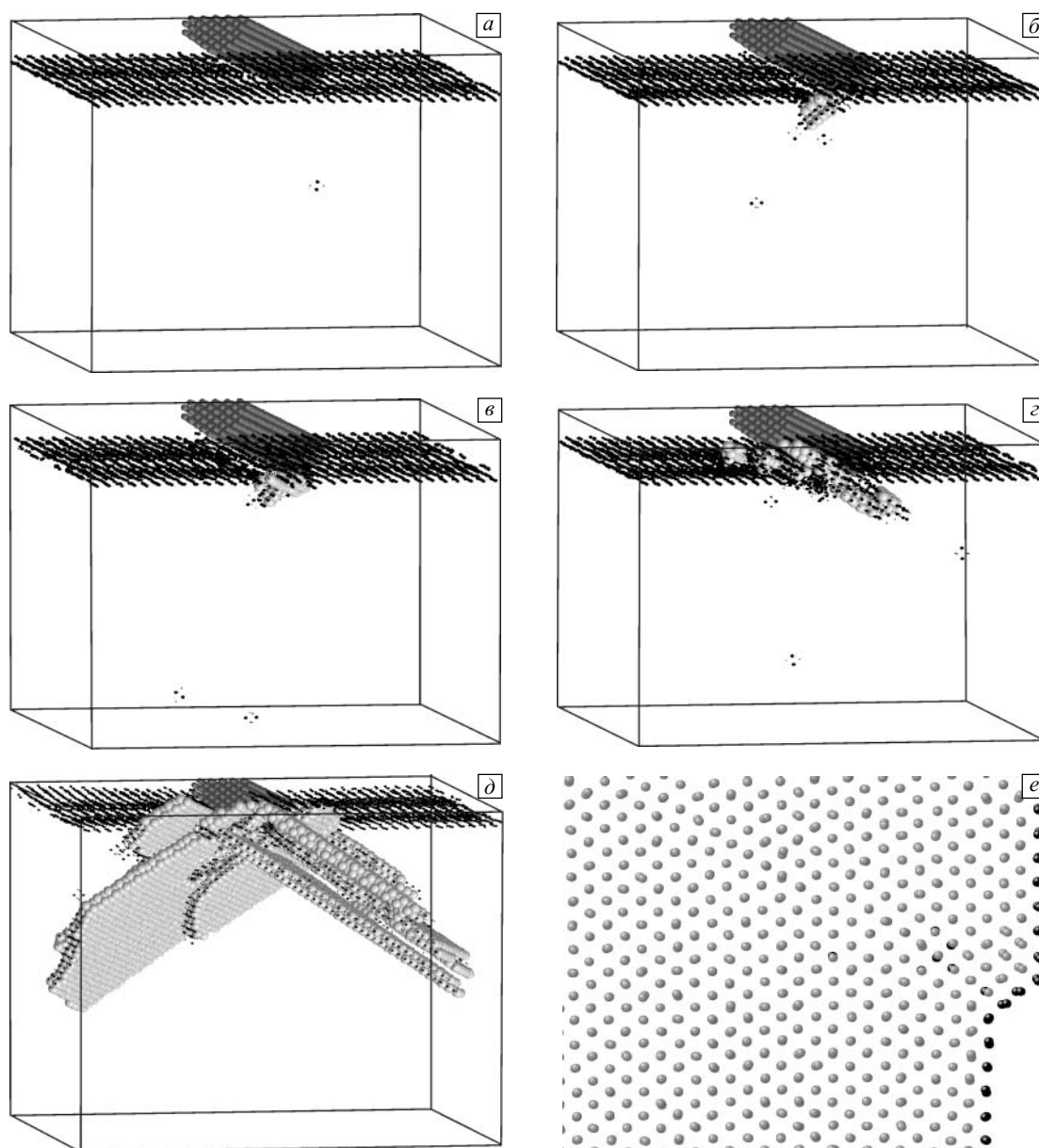


Рис. 11. Фрагмент моделируемого кристаллита для различных глубин вдавливания индентора: -0.2 (а), -0.1 (б), 0 (в), 0.15 (г), 0.87 нм (д). Атомы с ГЦК-симметрией окружения не показаны. Темно-серыми сферами обозначены атомы индентора, светлыми крупными сферами — протодефекты, темными точками — атомы с нарушенной симметрией. Ступенька на свободной поверхности (е)

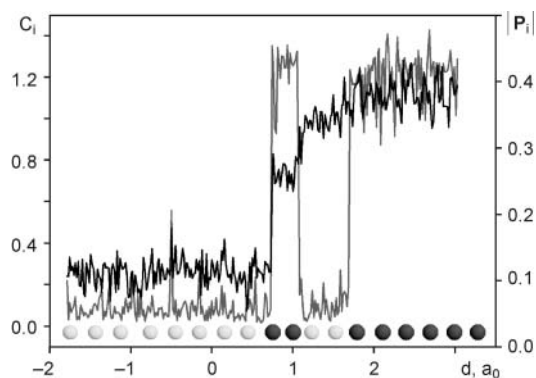


Рис. 12. Зависимость для выбранного атома значений безразмерных параметров несферичности (серая кривая) и локального сдвига (черная кривая) от глубины индентирования d , где a_0 — параметр решетки. Серый цвет сфер соответствует ГЦК-структуре, черный — ГПУ-структуре

стью возникает сила притяжения (на рис. 10 это соответствует отрицательному значению силы сопротивления). Данный эффект иногда называют «прыжком к контакту» [23]. Затем, по мере движения индентора, притяжение сменяется отталкиванием. В соответствии с этим сила сопротивления на рис. 10 имеет выраженный минимум. Зависимость силы сопротивления, рассчитанной для данных условий, от глубины вдавливания индентора можно разбить на четыре стадии.

Первая стадия, характеризующаяся линейной зависимостью силы сопротивления от глубины вдавливания, соответствует упругому отклику материала. Характерная структура кристаллита в данной области представлена на рис. 11, а. В начале второй стадии в зоне контакта индентора с кристаллитом начинают генерироваться локальные структурные трансформации (рис. 11, б). Генерация в идеальном кристаллите таких локальных структурных трансформаций ведет к частичному сбросу избыточных напряжений и уменьшению наклона кривой на рис. 10 с последующим выходом ее на плато. И хотя на данной стадии классические дефекты структуры, такие как дислокации и дефекты упаковки, еще не формируются, релаксация напряжений уже осуществляется посредством генерации протодефектов.

Следует отметить, что изменение характера поведения силы сопротивления непосредственно при переходе от первой стадии ко второй связано также с особенностями структуры индентора. В частности, по мере его движения во взаимодействие со свободной поверхностью вступают последующие атомные слои индентора. Первоначально это взаимодействие носит характер притяжения и таким образом величина силы сопротивления уменьшается. Число дефектов в зоне контакта во второй стадии достаточно быстро выходит на насыщение, после чего их количество на третьей стадии отклика меня-

ется слабо (рис. 11, в). Это приводит к тому, что данный механизм сброса избыточных напряжений исчерпывает себя, следствием чего является увеличение наклона кривой нагружения на третьей стадии.

Анализ результатов моделирования показывает, что дальнейшее вдавливание индентора (начало четвертой стадии) ведет к интенсивному росту числа протодефектов (рис. 11, з) и, как следствие, кривая нагружения не только замедляет рост, но и начинает спадать. При этом возникающие протодефекты приводят к формированию и развитию дефектов структуры более высокого ранга, в частности, дефектов упаковки внедрения и вычитания (рис. 11, з, д).

Отметим, что дефекты структуры в зоне контакта генерируются в атомных плоскостях типа (111). Сформированные дефекты упаковки могут распространяться по указанным плоскостям до выхода на свободные поверхности, что ведет к формоизменению кристаллита — образованию ступенек. Так, например, сформированная дефектная структура в нагружаемом кристаллите при достаточно большой глубине вдавливания в момент выхода дефектов упаковки на свободную поверхность представлена на рис. 11, д, а сформированная ступенька — на рис. 11, е.

Одним из ключевых моментов при исследовании поведения материала при индентировании является выбор методики идентификации локальных структурных изменений. Генерируемые при нагружении протодефекты определялись на основе подхода, учитывающего характер взаимного расположения ближайших соседей. К недостаткам данного метода можно отнести то, что он является качественным и показывает лишь сам факт произошедшего изменения. В настоящее время широко используются количественные методы определения степени нарушения структуры: параметр несферичности и параметр локального сдвига [20]. Поэтому представляет интерес оценить соответствие качественного и количественных подходов. С этой целью для одного из атомов, окружение которого претерпевает прямое и обратное превращение «ГЦК-решетка – протодефект – ГЦК-решетка» (схематически отражено цветом сфер, расположенных вдоль оси абсцисс на рис. 12), были рассчитаны приведенные параметры несферичности C_i и локального сдвига $|P_i|$. Из рисунка видно, что оба количественных параметра однозначно отображают наблюдаемое локальное структурное превращение. При этом параметр несферичности позволяет идентифицировать непосредственно факт структурной трансформации, в то время как изменение величины параметра локального сдвига носит «накопительный характер». Поэтому при изучении структурных трансформаций в процессе развития пластической деформации будет полезно использовать комплексный подход, включающий анализ по обоим параметрам.

5. Резюме

Проведенные исследования показали важную роль локальных структурных трансформаций при зарождении и развитии пластической деформации в зонах контактного взаимодействия различного типа. При этом элементарным актом пластической деформации является генерация локальных структурных трансформаций непосредственно вблизи зоны контакта. При увеличении степени деформации протодефекты начинают формировать дефекты более высокого ранга, такие как частичные и полные дислокации, планарные дефекты, которые, в свою очередь, могут приводить к образованию разориентированных наноразмерных областей, что впоследствии может привести к формированию устойчивого наноструктурного состояния.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований СО РАН № III.20.2 и при частичной финансовой поддержке проекта РФФИ № 11-08-00680-а.

Литература

1. Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. – Новосибирск: Наука, 1985. – 229 с.
2. Панин В.Е., Егорушкин В.Е. Деформируемое твердое тело как нелинейная иерархически организованная система // Физ. мезомех. – 2011. – Т. 14. – № 3. – С. 7–26.
3. Гриняев Ю.В., Псахье С.Г., Чертова Н.В. Фазовое пространство деформируемых тел // Физ. мезомех. – 2008. – Т. 11. – № 3. – С. 37–43.
4. Псахье С.Г., Остермайер Г.П., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Смолин А.Ю., Коростелев С.Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физ. мезомех. – 2000. – Т. 3. – № 2. – С. 5–13.
5. Psakhie S.G., Horie Y., Ostermeyer G.-P. et al. Movable cellular automata method for simulating materials with mesostructure // Theor. Appl. Fract. Mech. – 2001. – V. 37(1–3). – P. 311–334.
6. Popov V.L., Psakhie S.G., Shilko E.V., Dmitriev A.I. Quasi-fluid nanolayers at the interface between rubbing bodies: Simulation by movable cellular automata // Wear. – 2003. – V. 254. – No. 9. – P. 901–906.
7. Дмитриев А.И., Смолин А.Ю., Попов В.Л., Псахье С.Г. Многоуровневое моделирование процессов трения и износа на основе численных методов дискретной механики и феноменологической теории // Физ. мезомех. – 2008. – Т. 11. – № 4. – С. 15–24.
8. Псахье С.Г., Чертов М.А., Шилько Е.В. Интерпретация параметров метода подвижных клеточных автоматов на основе перехода к континуальному описанию // Физ. мезомех. – 2000. – Т. 3. – № 3. – С. 93–96.
9. Pim M. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 160 с.
10. Рубцов В.Е., Псахье С.Г., Колубаев А.В. Изучение особенностей формирования контакта шероховатых поверхностей на основе метода частиц // ПЖТФ. – 1998. – Т. 24. – № 5. – С. 28–32.
11. Горячева И.Г. Механика фрикционного взаимодействия. – М.: Наука, 2001. – 478 с.
12. Plimpton S.J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. – 1995. – V. 117. – P. 1–19.
13. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 59. – No. 5. – P. 3393–3407.
14. Van Swygenhoven H., Spaczer M., Caro A., Farkas D. Competing plastic deformation mechanisms in nanophase metals // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 60. – P. 22–25.
15. Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Lipnitskii A.G. On structural defect generation induced by thermal fluctuations in materials with a perfect lattice under dynamic loading // Phys. Lett. A. – 2006. – V. 349. – P. 509–512.
16. Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S. Elementary atomistic mechanism of crystal plasticity // Phys. Lett. A. – 2007. – V. 367. – P. 250–253.
17. Gouldstone A., Chollacoop N., Dao M., Li J., Minor A.M., Shen Y.L. Indentation across size scales and disciplines: Recent developments in experimentation and modeling // Acta Mater. – 2007. – V. 55. – P. 4015–4039.
18. Miller R.E., Rodney D. On the nonlocal nature of dislocation nucleation during nanoindentation // J. Mech. Phys. Solids. – 2008. – V. 56. – P. 1203–1223.
19. Delph T.J., Zimmerman J.A. Prediction of instabilities at the atomic scale // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. – 2010. – V. 18. – P. 045008.
20. Saraev D., Miller R.E. Atomic-scale simulations of nanoindentation-induced plasticity in copper crystals with nanometer-sized nickel coatings // Acta Mater. – 2006. – V. 54. – No. 1. – P. 161–167.
21. Болеста А.В., Фомин В.М. Молекулярно-динамическое моделирование вдавливания сферического индентора в тонкую пленку меди // Физ. мезомех. – 2009. – Т. 12. – № 3. – С. 73–80.
22. Berke P., Tam E., Delplancke-Ogletree M.-P., Massart T.J. Study of the rate-dependent behavior of pure nickel in conical nanoindentation through numerical simulation coupled to experiments // Mech. Mater. – 2009. – V. 41. – P. 154–164.
23. Szlufarska I. Atomistic simulations of nanoindentation // Mater. Today. – 2006. – V. 9 – P. 42–50.

Поступила в редакцию
23.01.2012 г.

Сведения об авторах

Псахье Сергей Григорьевич, д.ф.-м.н., чл.-к. РАН, дир. ИФПМ СО РАН, проф. ТГУ, зав. каф. ТПУ, sp@ispms.tsc.ru
 Зольников Константин Петрович, д.ф.-м.н., внс ИФПМ СО РАН, kost@ispms.tsc.ru
 Дмитриев Андрей Иванович, д.ф.-м.н., доц., внс ИФПМ СО РАН, проф. ТГУ, dmitr@ispms.tsc.ru
 Крыжевич Дмитрий Сергеевич, к.ф.-м.н., мнс ИФПМ СО РАН, kryzhev@ispms.tsc.ru
 Никонов Антон Юрьевич, асп. ИФПМ СО РАН, nikonov@usgroups.com