ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/94

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН
ДИСКЛИНАЦИОННОГО ТИПА В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ**

¹Суханов И.И., ^{1,2}Дитенберг И.А., ^{1,2}Тюменцев А.Н.

¹Томский государственный университет, Томск, Россия

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Представлены результаты теоретического анализа полей напряжений и распределения упругой энергии дисклинационной структуры межкристаллитных границ в наноструктурных металлических материалах в зависимости от размера зерен. В рамках континуального подхода использовалась структурная модель границ нанозерен, в которой заряд, описываемый частичными клиновыми дисклинациями, распределен и скомпенсирован по контуру зерна гексагональной формы. Расчет полей напряжений и энергий проводился в программной среде Maple 17 с использованием тензора напряжений частичной клиновой дисклинации с направлением линий дефекта вдоль оси z . Анализ энергии проведен с использованием численного интегрирования по методу Монте Карло.

С учетом суперпозиции полей напряжений в процессе экранировки дисклинационных скоплений обнаружено, что максимальные величины главных компонент тензора напряжений достигаются только в плоскостях залегания дисклинаций $P = Tr(\sigma_{ij})/3 \approx E/25$. В то время как градиенты этих напряжений характеризуются максимальными значениями в узловых точках $\partial P/\partial x \approx 0,08 E \text{ нм}^{-1}$. Установлено что, значительная часть сдвиговых компонент напряжений локализована внутри зерна.

Показано, что рассматриваемые конфигурации зернограницных дисклинаций обладают локальным энергетическим максимумом, который является характерной особенностью распределения удельной упругой энергии. Этот максимум, во-первых, можно интерпретировать как своеобразный энергетический барьер, в котором локализуется значительная часть упругой энергии; во-вторых, характеризует физическое уширение границы нанокристалла. Такое уширение можно связать с явлением увеличения доли зернограницной фазы при фрагментации зерен на наномасштабном структурном уровне. Проведенные полуколичественные оценки показывают, что в рамках исследуемой дисклинационной модели зерен доля зернограницной фазы (области локализации упругой энергии) составляет около $f \approx 60\%$ по отношению к объему зерна. Увеличение размеров нанозерен приводит к уменьшению и размытию обсуждаемого энергетического максимума. Характер и условия такой зависимости свидетельствует о важной роли масштабного фактора, который определяет как геометрию границ зерен, так и параметры энергетического максимума.

Работа выполнена в рамках программы гранта РФФИ №17-19-01374.