

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Физическая мезомеханика.

Материалы с многоуровневой иерархически
организованной структурой и интеллектуальные
производственные технологии»

6–10 сентября 2021 г.

Томск, Россия

DOI: 10.17223/978-5-907442-03-0-2021-351

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РАЗЛИЧНЫХ МЕХАНИЗМОВ ПЛАСТИЧЕСКОЙ
ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ОДНООСНОМ НАГРУЖЕНИИ НАНОПЛЕНОК FeNi
С ГРАДИЕНТНОЙ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРОЙ**

Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С., Чумаков Ю.А., Григорьев А.С.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В настоящей работе на основе компьютерного моделирования проведено изучение особенностей зарождения и развития пластичности в градиентных нанокристаллических образцах FeNi с аксиальной текстурой при одноосном растяжении. Моделирование проводилось в рамках метода молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS. Межатомное взаимодействие описывалось многочастичным потенциалом, разработанным в приближении метода погруженного атома. Нагружаемые образцы представляли собой наноразмерные пленки толщиной 80 нм. Свободные граничные условия задавались в направлении нормали к поверхности пленки. Периодические граничные условия использовались в двух других направлениях. Одно из них являлось направлением растяжения и совпадало с кристаллографической осью текстуры [123]. Вдоль второго направления с помощью баростата поддерживалось нулевое напряжение. Образцы состояли из зерен трех размеров: 30, 15 и 10 нм в диаметре, условно называемых крупные, средние и малые зерна. Слой крупных зерен находился в объеме пленки, а малые зерна - на поверхности.

Анализ структурных изменений показал, что процессы формирования, роста и движения дефектов в нагружаемых образцах имеют выраженную стадийность и зависят от размера зерен. Первоначально в крупных зернах зарождаются частичные дислокации Шокли, которые оставляют за собой дефекты упаковки (ДУ) вычитания. По мере роста деформации данные ДУ закрываются ведомыми дислокациями и крупные зерна становятся практически бездефектными. Далее сдвиги транслируются в зерна среднего размера, где также формируются ДУ вычитания, затем ДУ генерируются в зернах малого размера. При этом вплоть до 6% деформации большая часть пластических сдвигов происходит в крупных зернах. После деформации 6% и существенного сброса напряжений материал переходит в стадию пластического течения, на которой начинается интенсивное двойникование. На этой стадии плотность ДУ выходит на насыщение, часть сформированных ДУ трансформируется в двойники посредством скольжения частичных дислокаций в смежных с ДУ плоскостях $\{111\}$. По мере увеличения деформации максимальная объемная доля двойников смещается от больших зерен к малым. Таким образом, сдвиговая деформация в зернах меньшего размера все больше накапливается посредством двойникования, а в крупных зернах доминирует скольжение расщепленных полных дислокаций. После 10% растяжения все более выраженным становится проскальзывание по границам зерен, наиболее интенсивно проходящее в области малых зерен.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-79-10406).