

# **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

1

DOI: 10.17223/9785946217408/206

**МОДЕЛИ ДВОЙНИКОВАНИЯ И ФОРМИРОВАНИЯ ВЫСОКОУГЛОВЫХ ПЕРЕОРИЕНТАЦИЙ В НАНОКРИСТАЛЛАХ С ОЦК РЕШЕТКОЙ В УСЛОВИЯХ ФАЗОВОЙ НЕСТАБИЛЬНОСТИ**

<sup>1,2</sup>Литовченко И.Ю., <sup>1,2</sup>Тюменцев А.Н.

<sup>1</sup>*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

<sup>2</sup>*НИ Томский государственный университет, Томск, Россия*

Пластическая деформация ОЦК нанокристаллов реализуется с участием механического двойникования [1], однако его механизмы отличны от известных традиционных механизмов в крупнокристаллических материалах. Показано [2], что в процессе пластической деформации нанокристаллического Мо в вершине раскрывающейся трещины реализуется ОЦК-ГЦК-ОЦК превращение с формированием разориентированных  $54.7^\circ\langle 110 \rangle$  областей.

В настоящей работе предложена атомная модель двойникования и формирования высокоугловых разориентировок путем прямых плюс обратных (ОЦК–ГЦК–ОЦК) превращений, локализованных в нескольких соседних плоскостях  $\{112\}$ . В основе модели лежит предположение о достижении в зонах зарождения дефектов локальных внутренних напряжений, сопоставимых с теоретической прочностью идеального кристалла. Такие напряжения способны снизить стабильность исходной кристаллической фазы и обеспечить благоприятные термодинамические условия или движущую силу ОЦК–ГЦК превращения. Неравновесная, после частичной релаксации локальных напряжений, ГЦК фаза обладает термодинамическим стимулом к обратному ГЦК–ОЦК превращению. При наличии нескольких альтернативных систем такого превращения конкретная система определяется геометрией локального поля напряжений. В основе зарождения сдвигов прямых плюс обратных превращений лежат кооперативные тепловые колебания атомов плотноупакованных плоскостей кристаллической решетки.

Показано, что двойниковые переориентации формируются в процессе ОЦК-ГЦК-ОЦК превращений с изменением вектора сдвига обратного превращения при сохранении неизменной плоскости  $\{110\}$  ОЦК в процессе прямого плюс обратного превращения и выполнении ориентационного соотношения Курдюмова-Закса. При тех же условиях, но в случае ориентационных соотношений Нишиямы-Вассермана в результате прямых плюс обратных превращений формируются высокоугловые разориентировки  $60^\circ\langle 110 \rangle$ . Различие ориентационных соотношений прямого и обратного превращений (Нишиямы-Вассермана и Курдюмова-Закса) обеспечивает формирование переориентаций с векторами  $54.7^\circ\langle 110 \rangle$ .

Представленная модель хорошо описывает особенности высокоугловых переориентаций, полученных в нанокристаллах Мо, и подтверждается расчетными экспериментами, выполненными методами молекулярной в процессе пластической деформации нанокристаллов ОЦК Fe [3], где показано формирование деформационных двойников через последовательность структурных превращений ОЦК-ГЦК-ОЦК.

**Литература**

1. Wang J., Zeng Z., Weinberger C.R., Zhang Z., Zhu T., Mao S.X. In situ atomic-scale observation of twinning dominated deformation in nanoscale body-centred cubic tungsten // Nature Materials. 2015. Vol. 14. P. 594-600.
2. Wang S.J., Wang H., Du K., Zhang W., Sui M.L., Mao S.X. Deformation-induced structural transition in body-centred cubic molybdenum // Nature Communications. 2014. Vol. 5, 3433.
3. Корчуганов А.В. Зарождение и развитие локальных структурных трансформаций в упругодеформированной кристаллической решетке ОЦК железа при радиационном воздействии: дис. ... канд. физ.-мат. наук / А.В. Корчуганов. – Томск, 2016. – 129 с.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-19-01374).