

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:
<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučenija klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный
университет, 2020

УДК 539.5

Краткое сообщение

ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ДИНАМИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ ТЕКУЧЕСТИ СПЛАВОВ

В.В. Малашенко^{1,2}, Т.И. Малашенко^{3,4}

¹ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»

83114, Украина, Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

²ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»

283001, Украина, Донецк, ул. Университетская, 24

³ГОУ ВПО «Донецкий национальный технический университет»

83001, Украина, Донецк, ул. Артема, 58

⁴ГО ВПО «Донецкий национальный университет экономики и торговли

им. Михаила Туган-Барановского»

83050, Украина, Донецк, ул. Щорса, 31

malashenko@donfti.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.136

Аннотация: Теоретически проанализирована высокоскоростная деформация состаренных сплавов, содержащих зоны Гинье-Престона. Получено аналитическое выражение вклада зон Гинье-Престона в величину динамического предела текучести. Показано, что динамическое торможение дислокаций наноразмерными дефектами существенно отличается от торможения точечными дефектами.

Ключевые слова: дислокации, зоны Гинье-Престона, точечные дефекты, наноматериалы, высокоскоростная деформация, динамический предел текучести.

1. Введение

Зоны Гинье-Престона являются важным примером наноразмерных дефектов, представляющих интерес как с точки зрения фундаментальной науки, так и с практической точки зрения. В частности, в состаренных медно-алюминиевых сплавах зоны Гинье-Престона представляют собой диски из атомов меди толщиной от одного до нескольких атомных слоев и радиусом от нескольких нанометров до десятков нанометров. Зоны Гинье-Престона существенно влияют на механические свойства сплавов, при этом их влияние при квазистатической и высокоскоростной деформации оказывается различным. Это связано с изменением механизма диссипации при высокоскоростной деформации, который заключается в необратимом переходе энергии внешних воздействий в энергию поперечных колебаний дислокаций в плоскости скольжения. Высокоскоростная деформация реализуется при воздействии мощных лазерных импульсов и корпускулярных потоков, высокоскоростной обработке, динамическом канально-угловом прессовании, использовании взрыва для обработки и сварки материалов, при пробивании оболочек [1-5]. При этом скорость пластической деформации достигает значений $10^3 - 10^8 \text{ с}^{-1}$, а дислокации совершают надбарьерное скольжение и движутся со скоростями $v \geq 10^{-2} \text{ с}$, где c – скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле. Это так называемая динамическая область, в которой дислокация

преодолевает встречающиеся на ее пути препятствия без помощи термических флюктуаций. Упомянутый выше механизм диссипации весьма чувствителен к виду спектра дислокационных колебаний, в частности, к наличию в нем щели, а также к виду упругих полей, создаваемых дефектами структуры. Наличие щели в колебательном спектре означает, что дислокация совершают поперечные колебания в потенциальной параболической яме, перемещающейся по кристаллу вместе с ней. Такая яма может возникнуть в результате коллективного взаимодействия с данной дислокацией либо других движущихся дислокаций ансамбля, либо точечных дефектов, в частности, атомов второго компонента в бинарных сплавах. Конкуренция этих взаимодействий во многом определяет характер влияния дефектов на механические свойства материалов в условиях высокоскоростной деформации. Что касается упругих полей, создаваемых зонами Гинье-Престона, их вид существенно отличается от вида полей точечных дефектов, в результате чего при определенных условиях возможно возникновение эффекта сухого трения, при котором сила динамического торможения дислокаций этими зонами не зависит от скорости их перемещения, а, следовательно, и от скорости пластической деформации. Изучение влияния зон Гинье-Престона на динамику дислокаций в большинстве работ выполнялось на основе метода молекулярной динамики, однако этот метод не позволяет получать аналитические зависимости динамического торможения дислокаций, а, следовательно, и механических свойств сплавов от параметров этих структурных дефектов. Такие зависимости могут быть получены на основе развитой нами теории динамического взаимодействия структурных дефектов [6-9].

2. Постановка задачи и результаты

Пусть бесконечные краевые дислокации совершают скольжение под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в положительном направлении оси OX с постоянной скоростью v в кристалле, содержащем хаотически распределенные зоны Гинье-Престона. Линии дислокаций параллельны оси OZ , их векторы Бюргерса $\mathbf{b} = (b, 0, 0)$ одинаковы и параллельны оси OX . Плоскость скольжения дислокаций совпадает с плоскостью XOZ . Положение k -ой дислокации определяется функцией

$$X_k(y=0, z, t) = vt + w_k(y=0, z, t). \quad (1)$$

Здесь $w_k(y=0, z, t)$ – случайная величина, описывающая изгибные колебания дислокации, возбужденные ее взаимодействием с хаотически распределенными дефектами. Среднее значение этой величины по длине дислокации и по хаотическому распределению дефектов равно нулю. Зоны Гинье-Престона будем считать одинаковыми, имеющими радиус R и

распределенными случайным образом в плоскостях параллельных плоскости скольжения дислокации XOZ . Такая ситуация реализуется, например, в сплавах $Al-Cu$, где зоны Гинье-Престона имеют форму пластинокmonoатомной толщины.

Уравнение движения k -ой дислокации движущегося ансамбля может быть представлено в следующем виде

$$m \left\{ \frac{\partial^2 X}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \right\} = F_d + b \left[\sigma_0 + \sigma_{xy}^G \right] + F_k - B \frac{\partial X}{\partial t}, \quad (2)$$

где σ_{xy}^G – компонента тензора напряжений, создаваемых на линии дислокации зонами Гинье-Престона, F_d – сила, действующая на дислокацию со стороны атомов второго компонента, F_k – сила, действующая на нее со стороны остальных дислокаций ансамбля, m – масса единицы длины дислокации (массы всех дислокаций считаем одинаковыми), B – константа демпфирования, обусловленная фононными, магнонными или электронными механизмами диссипации.

Воспользовавшись результатами теории динамического взаимодействия структурных дефектов [6–9], вклад зон Гинье-Престона в величину динамического предела текучести бинарного сплава вычислим по формуле

$$\tau_G = \frac{n_G b}{8\pi^2 m} \int d^3 q |q_x| \cdot |\sigma_{xy}^G(\mathbf{q})|^2 \delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z)), \quad (3)$$

где $\omega(q_z)$ – спектр дислокационных колебаний, $\sigma_{xy}^G(\mathbf{q})$ – Фурье-образ компоненты тензора напряжений, созданных зонами Гинье-Престона, n_G – объемная концентрация этих зон. В рассматриваемом нами случае спектр дислокационных колебаний имеет вид

$$\omega^2(q_z) = c^2 q_z^2 + \Delta^2. \quad (4)$$

Здесь Δ – щель в спектре дислокационных колебаний. Если плотность подвижных дислокаций достигает значений $\rho = 10^{15} \text{ м}^{-2}$, то именно их коллективное взаимодействие вносит главный вклад в формирование спектральной щели, величина которой в этом случае определяется формулой

$$\Delta = \Delta_{dis} = \pi b \sqrt{\frac{\mu \rho}{6\pi m(1-\gamma)}} \approx c \sqrt{\rho}, \quad (5)$$

где μ – модуль сдвига, γ – коэффициент Пуассона.

Выполняя вычисления, получим, что в интервале скоростей движения дислокации $v < R\Delta_{dis}$ сила динамического торможения дислокации зонами Гинье-Престона приобретает характер сухого трения, и ее вклад в величину динамического предела текучести может быть описан выражением

$$\tau_G = \beta \frac{n_G R}{\sqrt{\rho}}, \quad (6)$$

где β – константа, зависящая от упругих модулей кристалла. Полученное выражение справедливо при скоростях движения дислокации $v < v_G$ (v_G – критическая скорость, $v_G = R\Delta_{dis}$). Оценим величину характерной скорости. Для значений $\rho = 10^{15}$ м⁻², $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $c = 3 \cdot 10^3$ м/с, $R = 3 \cdot 10^{-9}$ м получим $v_G = 10^{-1}c$.

При высокой концентрации атомов второго компонента главный вклад в формирование щели вносит их коллективное взаимодействие с дислокацией. Спектральная щель, обусловленная этим взаимодействием, имеет вид

$$\Delta = \Delta_{def} = \frac{c}{b} \left(n_{0d} \varepsilon^2 \right)^{1/4}, \quad (7)$$

где n_{0d} – безразмерная концентрация атомов второго компонента, ε – параметр их несоответствия. В этом случае вклад зон Гинье-Престона определяется выражение

$$\sigma_G = \eta \frac{n_G R}{\sqrt[4]{n_{0d}}}. \quad (8)$$

Здесь η – константа, определяемая упругими модулями кристалла и параметром несоответствия атомов второго компонента.

Выполним численную оценку вклада исследуемого механизма диссипации в величину динамического предела текучести. Для типичных значений $\mu = 5 \cdot 10^{10}$ Па, $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $R = 3 \cdot 10^{-9}$ м, $n_G = 4 \cdot 10^{24}$ м⁻³ получим $\tau_G = 10^8$ Па. Воспользовавшись результатами работы [4], приходим к выводу, что вклад динамического торможения зонами Гинье-Престона может составлять десятки процентов.

3. Заключение

Проведенный нами анализ показывает, что такие наноразмерные дефекты как зоны Гинье-Престона способны существенно влиять на формирование механических свойств бинарных сплавов, в частности, на динамический предел текучести. При этом в условиях высокоэнергетических воздействий на сплавы влияние зон Гинье-Престона в значительной степени зависит от наличия других структурных дефектов, в частности, от концентрации атомов второго компонента и плотности подвижных дислокаций. Выполненные численные оценки подтверждают, что вклад данных нанодефектов в величину динамического предела текучести может быть весьма значительным. Полученные результаты могут быть полезными при анализе поведения функциональных сплавов в

условиях ударных нагрузок.

Библиографический список:

1. **Batani, D.** Matter in extreme conditions produced by lasers / D. Batani // Europhysics Letters. – 2016. – V. 114. – № 6. – P. 65001-p1-650001-p7. DOI: 10.1209/0295-5075/114/65001.
2. **Lee, J.H.** High strain rate deformation of layered nanocomposites / J.H. Lee, D. Veyssset, J.P. Singer, et al. // Nature Communications. – 2012. – V. 3. – Art. № 1164. – 9 p. DOI: 10.1038/ncomms2166.
3. **Smith, R.F.** High strain-rate plastic flow in *Al* and *Fe* Collins / R.F. Smith, J.H. Eggert, R.E. Rudd, et al. // Journal of Applied Physics. – 2011. – V. 110. – I. 12. – P. 123515-1-123515-11. DOI: 10.1063/1.3670001.
4. **Yanilkin, A.V.** Dynamics and kinetics of dislocations in *Al* and *Al–Cu* alloy under dynamic loading / A.V. Yanilkin, V.S. Krasnikov, A.Yu. Kuksin, A.E. Mayer // International Journal of Plasticity. – 2014. – V. 55. – P. 94-107. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.09.008.
5. **Tramontina, D.** Molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity in tantalum / D. Tramontina, P. Erhart, T. Germann, et al. // High Energy Density Physics. – 2014. – V. 10. – P. 9-15. DOI: 10.1016/j.hedp.2013.10.007.
6. **Malashenko, V.V.** A magnetic field suppresses plastic strain jumps during low-temperature deformation of two-component alloys / V.V. Malashenko // Technical Physics Letters. – 2019. – V. 45. – I. 6. – P. 588-590. DOI: 10.1134/S1063785019060269.
7. **Malashenko, V.V.** Dynamic drag of dislocation by point defects in near-surface crystal layer / V.V. Malashenko // Modern Physics Letters B. – 2009. – V. 23. – I. 16. – P. 2041-2047. DOI: 10.1142/S0217984909020199.
8. **Malashenko, V.V.** Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects / V.V. Malashenko // Physica B: Condensed Matter. – 2009. – V. 404. – I. 21. – P. 3890-38932. DOI: 10.1016/j.physb.2009.07.122.
9. **Malashenko, V.V.** Influence of the Guinier–Preston zones on the concentration dependence of the yield point of the aged two-component alloys in conditions of high-speed deformation / V.V. Malashenko // Physics of the Solid State. – 2019. – V. 61. – I. 10. – P. 1800-1803. DOI: 10.1134/S106378341910024X.

References:

1. **Batani, D.** Matter in extreme conditions produced by lasers / D. Batani // Europhysics Letters. – 2016. – V. 114. – № 6. – P. 65001-p1-650001-p7. DOI: 10.1209/0295-5075/114/65001.
2. **Lee, J.H.** High strain rate deformation of layered nanocomposites / J.H. Lee, D. Veyssset, J.P. Singer, et al. // Nature Communications. – 2012. – V. 3. – Art. № 1164. – 9 p. DOI: 10.1038/ncomms2166.
3. **Smith, R.F.** High strain-rate plastic flow in *Al* and *Fe* Collins / R.F. Smith, J.H. Eggert, R.E. Rudd, et al. // Journal of Applied Physics. – 2011. – V. 110. – I. 12. – P. 123515-1-123515-11. DOI: 10.1063/1.3670001.
4. **Yanilkin, A.V.** Dynamics and kinetics of dislocations in *Al* and *Al–Cu* alloy under dynamic loading / A.V. Yanilkin, V.S. Krasnikov, A.Yu. Kuksin, A.E. Mayer // International Journal of Plasticity. – 2014. – V. 55. – P. 94-107. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.09.008.
5. **Tramontina, D.** Molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity in tantalum /

- D. Tramontina, P. Erhart, T. Germann, et al. // High Energy Density Physics. – 2014. – V. 10. – P. 9-15. DOI: 10.1016/j.hedp.2013.10.007.
6. **Malashenko, V.V.** A magnetic field suppresses plastic strain jumps during low-temperature deformation of two-component alloys / V.V. Malashenko // Technical Physics Letters. – 2019. – V. 45. – I. 6. – P. 588-590. DOI: 10.1134/S1063785019060269.
7. **Malashenko, V.V.** Dynamic drag of dislocation by point defects in near-surface crystal layer / V.V. Malashenko // Modern Physics Letters B. – 2009. – V. 23. – I. 16. – P. 2041-2047. DOI: 10.1142/S0217984909020199.
8. **Malashenko, V.V.** Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects / V.V. Malashenko // Physica B: Condensed Matter. – 2009. – V. 404. – I. 21. – P. 3890-38932. DOI: 10.1016/j.physb.2009.07.122.
9. **Malashenko, V.V.** Influence of the Guinier–Preston zones on the concentration dependence of the yield point of the aged two-component alloys in conditions of high-speed deformation / V.V. Malashenko // Physics of the Solid State. – 2019. – V. 61. – I. 10. – P. 1800-1803. DOI: 10.1134/S106378341910024X.

Short Communication

**THE EFFECT OF NANOSCALE DEFECTS ON THE DYNAMIC YIELD STRESS OF
ALLOYS**

V.V. Malashenko^{1,2}, T.I. Malashenko^{3,4}

¹*Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A.Galkin, Donetsk, Ukraine*

²*Donetsk National University, Donetsk, Ukraine*

³*Donetsk National Technical University, Donetsk, Ukraine*

⁴*Donetsk National University of Economics and Trade named after Mikhail Tugan-Baranovskiy, Donetsk, Ukraine*

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.136

Abstract: The high strain rate deformation of aged alloys containing Guinier–Preston zones is theoretically analyzed. The analytical expression for the contribution of the Guinier–Preston zones to the value of the dynamic yield stress has been obtained. It is shown that the dynamic drag of dislocations by nanoscale defects differs significantly from the drag by point defects.

Keywords: *dislocations, Guinier–Preston zones, point defects, nanomaterials, high strain rate deformation, dynamic yield stress.*

Малашенко Вадим Викторович – д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник отдела «Теория кинетических и электронных свойств нелинейных систем», ГУ «Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина», профессор кафедры радиофизики и инфокоммуникационных технологий, ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»

Малашенко Татьяна Ивановна – старший преподаватель кафедры физики, ГОУ ВПО «Донецкий национальный технический университет», старший преподаватель кафедры естествознания и безопасности жизнедеятельности, ГО ВПО «Донецкий национальный университет экономики и торговли им. Туган-Барановского»

Vadim V. Malashenko – Dr. Sc., Professor, Chief Researcher of the Department «Theory of kinetic and electronic properties of nonlinear systems», Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin, Professor, Department of Radiophysics and Infocommunication Technologies, Donetsk National University

Tatyana I. Malashenko – Senior Lecturer, Department of Physics, Donetsk National Technical University, Senior Lecturer, Department of Natural Sciences and Life Safety, Donetsk National University of Economics and Trade named after Mikhail Tugan-Baranovskiy

Поступила в редакцию/received: 20.08.2020; после рецензирования/revised: 14.09.2020; принятa/accepted 30.09.2020.