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

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

## 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 Межвузовском сборнике научных трудов «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, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих физико-химических результаты исследований области изучения В процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, межфазные явления нанотермодинамику. Сборник включая И работников, инженерно-технических предназначен для научных И 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 izučeniâ 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, 2019

© Тверской государственный университет, 2019

УДК 539.5

Оригинальная статья

# ОСОБЕННОСТИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ДИНАМИКИ В ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ НАНООБЛАСТИ КРИСТАЛЛА

В.В. Малашенко<sup>1,2</sup>, Т.И. Малашенко<sup>3,4</sup>

 <sup>1</sup>ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина» 83114, Украина, Донецк, ул. Р. Люксембург, 72
 <sup>2</sup>ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет» 283001, Украина, Донецк, ул. Университетская, 24
 <sup>3</sup>ГОУ ВПО «Донецкий национальный технический университет» 83001, Украина, Донецк, ул. Артема, 58
 <sup>4</sup>ГО ВПО «Донецкий национальный университет экономики и торговли им. Михаила Туган-Барановского» 83050, Украина, Донецк, ул. Щорса, 31 malashenko@donfti.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.192 Аннотация: Теоретически проанализировано скольжение дислокаций в приповерхностном нанослое кристалла, содержащего точечные дефекты. Получено аналитическое выражение силы динамического торможения дислокаций точечными дефектами. Показано, что поверхность кристалла оказывает существенное влияние на динамику дислокаций в приповерхностной области.

Ключевые слова: дислокации, точечные дефекты, поверхность, наноматериалы.

#### 1. Введение

Свободная поверхность кристалла оказывает большое влияние на формирование различных свойств наноматериалов, В том числе механических. Механические свойства материалов в значительной степени определяются движением дислокаций и их взаимодействием с другими дефектами кристаллической структуры, в частности, точечными (примеси, вакансии, междоузельные атомы), концентрация которых может быть весьма высокой. Медленно движущиеся дислокации преодолевают локальные барьеры, создаваемые дефектами, с помощью термических флуктуаций. Кинетическая энергия быстро движущихся дислокаций превосходит высоту потенциальных барьеров [1]. Это происходит в динамической области движения, которая включает скорости  $v \ge 10^{-2} c$ , где с – скорость распространения поперечных звуковых волн. Динамический высокоскоростной режим движения реализуется при обработке материалов, ударной деформации, высокоэнергетических воздействиях мощных лазерных импульсов и корпускулярных потоков, динамическом канальноугловом прессовании, при использовании сварки взрывом [1-4]. Значительное количество задач о надбарьерном движении дислокаций решается методом молекулярной динамики [1]. Однако этот метод не позволяет получить аналитические выражения зависимостей силы динамического торможения дислокаций от характеристик исследуемого материала и содержащихся в нем дефектов. Получить такие зависимости в аналитическом виде можно в рамках развитой нами теории динамического взаимодействия структурных дефектов [5-8].

В настоящей работе теоретически исследуется влияние свободной поверхности на динамику краевых дислокаций, движущихся параллельно этой поверхности.

#### 2. Постановка задачи и результаты

Пусть бесконечная краевая дислокация движется под действием постоянного внешнего напряжения  $\sigma_0$  в положительном направлении оси *OX* с постоянной скоростью *v* параллельно поверхности кристалла, совпадающей с плоскостью *XOY*. Точечные дефекты хаотически распределены по объему кристалла. Линия дислокации параллельна оси *OY*, а ее вектор Бюргерса параллелен оси *OX*. Точкам кристалла отвечают значения  $z \le 0$ . Плоскость скольжения дислокации совпадает с плоскостью z = -L, а положение дислокации определяется функцией

$$X(z = -L, y, t) = vt + w(z = -L, y, t),$$
(1)

где функция w(z = -L, y, t) является случайной величиной, описывающей колебания элементов краевой дислокации в плоскости скольжения относительно невозмущенной дислокационной линии.

Уравнение движения дислокации имеет следующий вид

$$m\left\{\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 X}{\partial y^2}\right\} = b\left[\sigma_0 + \sigma_{xz}(vt + w; y) + \sigma_{xz}^S(vt + w; y)\right] - B\frac{\partial X}{\partial t}.$$
 (2)

Здесь  $\sigma_{xz}$  – компонента тензора напряжений, создаваемых точечными дефектами на линии дислокации,  $\sigma_{xz} = \sum_{i=1}^{N} \sigma_{xz,i}$ , N – число дефектов,  $\sigma_{xz}^{s}$  –

силы изображения, действующие на дислокацию благодаря наличию свободной поверхности, b – модуль вектора Бюргерса дислокации, m – масса единицы длины дислокации, B – константа демпфирования, обусловленная фононными, магнонными, электронными либо иными механизмами диссипации, характеризующимися линейной зависимостью силы торможения дислокации от скорости ее скольжения, c – скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле. Влиянием константы демпфирования на величину силы торможения дислокации точечными дефектами можно пренебречь в силу малости безразмерного параметра  $\alpha = Bbv/(mc^2)$ , который, согласно оценкам [5, 6], является малым в подавляющем большинстве случаев.

Воспользовавшись результатами теории динамического взаимодействия структурных дефектов [5-8], запишем силу динамического торможения дислокации точечными дефектами в следующем виде

$$F_{d} = \frac{nb^{2}}{4\pi m} \int dq_{x} dq_{y} |q_{x}| \cdot |\sigma_{xz}(q_{x}, q_{y}, z)|^{2} \,\delta(q_{x}^{2}v^{2} - \omega^{2}(q_{y})), \qquad (3)$$

где n – объемная концентрация точечных дефектов,  $\delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_y))$  – это  $\delta$  – функция Дирака,  $\omega(q_y)$  – спектр дислокационных колебаний.

Для вычисления силы изображения, действующей на дислокацию, воспользуемся стандартным методом изображений. Суть его заключается в построении изображения дислокации таким образом, чтобы суммарные напряжения дислокации  $\sigma_{ik}^{d}$  и ее изображения  $\sigma_{ik}^{i}$  на свободной поверхности равнялись нулю. Если же при этом какие-либо суммарные компоненты все же оказываются не равными нулю на поверхности, к решению добавляется дополнительное слагаемое, вычисленное с помощью функции напряжений  $\psi$ , которое и обеспечивает выполнение граничного условия.

Выполняя несложные, но довольно громоздкие вычисления получим дополнительное слагаемое, обеспечивающее выполнение граничных условий

$$\sigma_{xz}^{0} = \frac{\mu b}{2\pi (1-\gamma)} \frac{2x \left( (z-L)^{4} + 6zL(z-L)^{2} - 2zLx^{2} - x^{4} \right)}{\left( x^{2} + (z-L)^{2} \right)^{3}}.$$
 (4)

Здесь  $\mu$  – модуль сдвига,  $\gamma$  – коэффициент Пуассона.

Благодаря добавлению этого слагаемого граничное условие удовлетворяется, т.е. при z = 0 получим  $\sigma_{xz}^d + \sigma_{xz}^i + \sigma_{xz}^0 = 0$ . Таким образом, дополнительные напряжения, возникающие на линии дислокации благодаря наличию свободной поверхности, определяются выражением

$$\sigma_{xz}^{s} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\gamma)} \frac{x\left((z-L)^{4} + 12zL(z-L)^{2} - 4zLx^{2} - x^{4}\right)}{\left(x^{2} + (z-L)^{2}\right)^{3}}.$$
(5)

На невозмущенной линии дислокации эти напряжения равны нулю:  $\sigma_{xz}^{s} = 0$  при x = 0, т.е. наличие поверхности не приводит к возникновению сил, действующих на прямолинейную краевую дислокацию в плоскости скольжения параллельной этой поверхности. Однако поверхность изменяет форму спектра дислокационных колебаний. Чтобы получить явный вид этого спектра, в уравнении движения перейдем в систему центра масс дислокации, предварительно разложив  $\sigma_{xz}^{s}(vt+w; y)$  по малому параметру w/L

$$\sigma_{xz}^{s}(vt + w; y) = -D\frac{w}{4L^{2}}.$$
 (6)

Выполняя преобразование Фурье, получим спектр колебаний в виде

$$\omega^2 = c^2 p_z^2 + \Delta^2, \ \Delta = \frac{b}{L} \sqrt{\frac{D}{2m}} \approx \frac{c}{L}.$$
 (7)

Таким образом, скольжение краевой дислокации параллельно поверхности в некотором смысле эквивалентно задаче о движении пары дислокаций. В данном случае пару образуют дислокация и ее изображение.

Воспользовавшись результатами теории динамического взаимодействия, получим выражение аналитическое для силы торможения динамического дислокаций точечными дефектами В приповерхностной области

$$F_d = \frac{\pi}{3(1-\gamma)} \frac{nb^4 \mu^2 \varepsilon^2 L^2 \nu}{mc^3}.$$
 (8)

Численные оценки показывают, что в приповерхностной области сила торможения может быть на один-два порядка меньше чем в областях, удаленных от поверхности.

Выполним численные оценки глубины приповерхностного слоя, в пределах которого поверхность оказывает существенное влияние на динамическое взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Для типичных значений  $c = 3 \cdot 10^3$  м/с,  $b = 3 \cdot 10^{-10}$  м,  $n_{0V} \approx 10^{-2} \div 10^{-6}$ ,  $v \approx 10^{-2} \div 10^{-1} c$  получим, что толщина оцениваемого слоя может составлять от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров.

#### 3. Заключение

Проведенный анализ подтверждает существенное влияние поверхности на механические свойства наноматериалов, тонких пленок, а также приповерхностных слоев обычных кристаллов. Важность таких исследований подтверждается в работах [9, 10]. Полученные результаты могут быть полезными для целенаправленного изменения механических свойств как обычных кристаллов, так и наноматериалов.

#### Библиографический список:

1. **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.

2. Lee, J.H. High strain rate deformation of layered nanocomposites / J.H. Lee, D. Veysset, J.P. Singer, et al. // Nature Communications. -2012. - V. 3. - Article No 1164. - 9 p.

3. Smith, R.F. High strain-rate plastic flow in Al and Fe / R.F. Smith, J.H. Eggert, R.E. Rudd, et al. // Journal of Applied Physics. – 2011. – V. 110. – I. 12. – P. 123515-123515-11.

4. **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.

5. **Malashenko, V.V.** Dynamic drag of dislocation by point defects in near-surface crystal layer / V.V. Malashenko // Modern Physics Letters B.  $-2009. - V. 23. - N_{2} 16. - P. 2041-2047.$ 

6. **Malashenko, V.V.** The effect of Guinier–Preston zones on the dynamic yield stress of alloys under the shock-wave load / V.V. Malashenko // Technical Physics. -2017. - V. 62. - I. 5. - P. 810-811.

7. **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. 3890-3893.

8. Varyukhin, V.N. Dynamic effects in a defective system of crystal / V.N. Varyukhin, V.V. Malashenko // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. -2018. - V. 82. - I. 9. - P. 1101-1105.

9. Golovin, Yu.I. Nanoindentation and mechanical properties of solids in submicrovolumes, thin near-surface layers, and films: a review / Yu.I. Golovin // Physics of the Solid State. – 2008. – V. 50. – I. 12. – P. 2205-2236.

10. **Nahirnyj, T.** Mathematical modeling of near-surface non-homogeneity in nanoelements / T. Nahirnyj, K. Tchervinka // Mathematical Modeling and Computing. – 2014. – V. 1. – I. 1. – P. 61-74.

#### **References:**

1. **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.

2. Lee, J.H. High strain rate deformation of layered nanocomposites / J.H. Lee, D. Veysset, J.P. Singer, et al. // Nature Communications. -2012. - V. 3. - Article No 1164. - 9 p.

3. Smith, R.F. High strain-rate plastic flow in Al and Fe / R.F. Smith, J.H. Eggert, R.E. Rudd, et al. // Journal of Applied Physics. – 2011. – V. 110. – I. 12. – P. 123515-123515-11.

4. **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.

5. 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. – № 16. – P. 2041-2047.

6. **Malashenko, V.V.** The effect of Guinier–Preston zones on the dynamic yield stress of alloys under the shock-wave load / V.V. Malashenko // Technical Physics. -2017. - V. 62. - I. 5. - P. 810-811.

7. **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. 3890-3893.

8. **Varyukhin, V.N.** Dynamic effects in a defective system of crystal / V.N. Varyukhin, V.V. Malashenko // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2018. – V. 82. – I. 9. – P. 1101-1105.

9. Golovin, Yu.I. Nanoindentation and mechanical properties of solids in submicrovolumes, thin near-surface layers, and films: a review / Yu.I. Golovin // Physics of the Solid State. – 2008. – V. 50. – I. 12. – P. 2205-2236.

10. **Nahirnyj, T.** Mathematical modeling of near-surface non-homogeneity in nanoelements / T. Nahirnyj, K. Tchervinka // Mathematical Modeling and Computing. – 2014. – V. 1. – I. 1. – P. 61-74.

#### Original paper

#### FEATURES OF DISLOCATION DYNAMICS IN NEAR-SURFACE NANOREGION OF CRYSTAL

V.V. Malashenko<sup>1,2</sup>, T.I. Malashenko<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A.Galkin, Donetsk, Ukraine <sup>2</sup>Donetsk National University, Donetsk, Ukraine <sup>3</sup>Donetsk National Technical University, Donetsk, Ukraine

<sup>4</sup>Donetsk National University of Economics and Trade named after Mikhail Tugan-Baranovskiy,

Donetsk, Ukraine

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.192

Abstract: The glide of dislocations in a near-surface nanolayer of crystal containing point defects is theoretically analyzed. An analytical expression for the dynamic drag force of dislocations by point defects is obtained. It has been shown that the crystal surface has a significant effect on the dislocation dynamics in the near-surface region.

Keywords: dislocations, point defects, surface, nanomaterials.

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, 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: 20.08.2019; после рецензирования/revised: 27.09.2019; принята/accepted 30.10.2019.