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 13

ТВЕРЬ 2021

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: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – Вып. 13. – 956 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 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, 2021

© Тверской государственнй университет, 2021

УДК 539.5

Оригинальная статья

ОСОБЕННОСТИ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛАХ С НАНОРАЗМЕРНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

В.В. Малащенко^{1,2}, Т.И. Малащенко^{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/2021.13.272

Аннотация: Теоретически проанализирована высокоскоростная деформация сплавов, содержащих зоны Гинье-Престона, в условиях высокоэнергетических внешних воздействий. Анализ выполнен в рамках теории динамического взаимодействия структурных дефектов. Исследуемый механизм диссипации заключается в необратимом переходе энергии внешних воздействий в энергию дислокационных колебаний. Получено аналитическое выражение динамического предела текучести с учетом всех структурных дефектов, содержащихся в сплаве. Показано, что в условиях высокоэнергетических внешних воздействий наноразмерные дефекты влияют на характер зависимости механических свойств от концентрации атомов второго компонента. Зависимость динамического предела текучести от концентрации атомов второго компонента становится немонокотонной и имеет минимум. Выполнены численные оценки концентрации, при которой предел текучести становится минимальным. При таком значении концентрации происходит переход от доминирования торможения дислокации зонами Гинье-Престона к доминированию торможения атомами второго компонента.

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

1. Введение

Исследование наноразмерных объектов является одним из перспективных направлений современного материаловедения. Большое внимание уделяется изучению влияния наноразмерных дефектов на различные свойства макроскопических объектов, прежде всего механические. Классическим примером наноразмерного дефекта являются зоны Гинье-Престона, образующиеся в ряде сплавов на первой стадии искусственного или естественного старения. Эти зоны представляют собой диски, радиус которых может достигать десятков нанометров. Зоны Гинье-Престона оказывают влияние на механические свойства функциональных материалов как при квазистатической, так и при высокоскоростной деформации, однако в случае высокоскоростной деформации это влияние

имеет специфические особенности, обусловленные изменением механизма диссипации. Высокоскоростная деформация может иметь место как при обработке материалов (резка, штамповка, ковка, динамическое прессование, лазерная обработка), так и процессе эксплуатации в условиях высокоэнергетических внешних воздействий, в частности, ударных [1-6]. Основным механизмом пластической деформации является, как известно, движение дислокаций, скорость которых при высокоскоростном деформировании достигает сотен и даже тысяч метров в секунду. Скорость пластической деформации может при этом составлять $10^3 - 10^8 \text{ с}^{-1}$. Столь высокие скорости дислокационного движения приводят к изменению характера взаимодействия дислокаций с неподвижными структурными дефектами. Кинетическая энергия дислокаций превышает потенциальные барьеры, создаваемые такими дефектами, в результате чего дислокация совершает надбарьерное движение, а механизм диссипации при этом заключается в необратимом переходе энергии внешних воздействий в энергию дислокационных колебаний. Эффективность возбуждения таких колебаний существенно зависит от вида спектра дислокационных колебаний, прежде всего от наличия спектральной щели, которая может возникать в результате коллективного взаимодействия примесей с каждой из дислокаций ансамбля. Предел текучести и прочность материала определяется силой торможения дислокаций структурными дефектами. Наличие в материале наноразмерных дефектов существенно влияет на вид зависимости механических свойств от характеристик материала, в частности, от концентрации примесных атомов. В работе [7] было получено аналитическое выражение для вклада зон Гинье-Престона в величину динамического предела текучести сплава. В настоящей работе вычислен динамический предел текучести сплава с учетом вклада всех содержащихся в нем структурных дефектов и показано, что зависимость предела текучести от концентрации атомов второго компонента становится немонотонной благодаря наличию наноразмерных дефектов.

2. Постановка задачи и результаты

Для решения задачи о концентрационной зависимости динамического предела текучести материала воспользуемся развитой нами теорией динамического взаимодействия структурных дефектов, согласно которой дислокация рассматривается как упругая струна, обладающая эффективной массой полевого происхождения и совершающая колебания в подвижной потенциальной яме, наличие которой приводит к появлению щели в спектре дислокационных колебаний [8-11]. Эта яма может сформироваться благодаря коллективному воздействию на каждую движущуюся дислокацию либо других дислокаций ансамбля, либо примесных атомов. В

случае высокой концентрации атомов второго компонента в бинарном сплаве именно коллективное воздействие этих атомов вносит главный вклад в формирование спектральной щели, а ее явный вид находится из уравнения

$$\Delta_d^2 = \frac{nb^2}{8\pi^3 m^2} \iiint d^3 p \frac{p_x^2 |\sigma_{xy}(\mathbf{p})|^2}{\Delta_d^2 + c^2 p_z^2 - p_x^2 v^2}. \quad (1)$$

Здесь n – объемная концентрация атомов второго компонента, m – масса единицы длины дислокации, b – модуль вектора Бюргерса дислокации, $\sigma_{xy}(\mathbf{p})$ – Фурье-образ компоненты тензора напряжений, создаваемых на линии дислокации атомами второго компонента, c – скорость поперечных звуковых волн в сплаве. Спектральная щель, обусловленная коллективным взаимодействием этих дефектов, имеет вид

$$\Delta_d = \frac{c}{b} (n_d \chi^2)^{1/4}. \quad (2)$$

Здесь χ – параметр несоответствия атомов второго компонента, $n_d = nb^3$ – их безразмерная концентрация.

В общем случае вклад в формирование дислокационного спектра могут вносить и атомы второго компонента, и дислокации

$$\Delta = \frac{c}{b} \sqrt{\rho b^2 + \sqrt{n_d \chi^2}}. \quad (3)$$

Динамический предел текучести бинарного сплава содержит слагаемые, обусловленные торможением движущихся дислокаций другими дислокациями, атомами второго компонента, зонами Гинье-Престона, фононами

$$\tau = \tau_T + \tau_G + \tau_d + \tau_f. \quad (4)$$

Здесь τ_T – слагаемое, определяемое соотношением Тейлора

$$\tau_T = \alpha \mu b \sqrt{\rho}, \quad (5)$$

где μ – модуль сдвига, ρ – плотность дислокаций, α – безразмерный коэффициент порядка единицы.

Вклад фононного торможения τ_f , определяется из соотношения

$$\tau_f = \frac{B \dot{\epsilon}}{\rho b c}. \quad (6)$$

Здесь B – константа демпфирования, обусловленная фононными, магннными или электронными механизмами диссипации, $\dot{\epsilon}$ – скорость пластической деформации.

Далее следуют τ_G – вклад силы динамического торможения дислокации зонами Гинье-Престона и τ_d – вклад силы торможения точечными дефектами (атомами второго компонента). Воспользовавшись результатами теории динамического взаимодействия структурных дефектов [8-11], получим выражение для τ_G

$$\tau_G = \mu \frac{n_G b R c}{\Delta}. \quad (7)$$

Здесь n_G – объемная концентрация зон Гинье-Престона. Из полученной формулы следует, что вклад зон Гинье-Престона не зависит от скорости пластической деформации. Причиной этого является тот факт, что динамическое торможение дислокаций зонами Гинье-Престона имеет характер сухого трения при скоростях

$$\dot{\varepsilon} < \rho b^2 \Delta. \quad (8)$$

Выражение для вклада атомов второго компонента также получим на основе теории динамического взаимодействия структурных дефектов

$$\tau_d = \mu \frac{n_d \chi^2}{\rho b^2 (\rho b^2 + \sqrt{n_d \chi^2})} \left(\frac{\dot{\varepsilon} b}{c} \right). \quad (9)$$

Анализ полученных выражений показывает, что зависимость динамического предела текучести бинарного сплава от концентрации атомов второго компонента становится немонотонной: она имеет минимум при значении концентрации

$$n_{\min} = \sqrt[3]{\left(\frac{n_G \rho b^3 R c}{2 \dot{\varepsilon} \chi^3} \right)^4}. \quad (10)$$

Выполним численные оценки для состаренного алюминий-медного сплава. Для значений $\chi = 10^{-1}$, $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $R = 10^{-9}$ м, $n_G = 10^{23}$ м⁻³, $\dot{\varepsilon} = 10^6$ с⁻¹, $\rho = 10^{14}$ м⁻², $c = 3 \cdot 10^3$ м/с получим $n_{\min} = 10^{-2}$. При таком значении концентрации происходит переход от доминирования торможения дислокации зонами Гинье-Престона к доминированию торможения атомами второго компонента.

3. Заключение

Проведенный нами анализ показывает, что в условиях высокоскоростной деформации наноразмерные дефекты типа зон Гинье-Престона могут не только оказывать значительное влияние на механические свойства функциональных материалов, но и способны изменить характер влияния на эти свойства других структурных дефектов, в частности, атомов второго компонента. Неупругие процессы в условиях высокоскоростной деформации сплавов, содержащих зоны Гинье-Престона, существенно отличаются от аналогичных процессов в условиях квазистатической деформации, что обусловлено изменением механизма диссипации при высокоэнергетических внешних воздействиях.

Полученные результаты могут быть полезными при анализе поведения функциональных сплавов в условиях высокоскоростной обработки и интенсивных динамических нагрузок.

Библиографический список:

1. **Kanel, G.I.** Effects of temperature and strain on the resistance to high-rate deformation of copper in shock waves / G.I. Kanel, A.S. Savinykh, G.V. Garkushin, S.V. Razorenov // *Journal of Applied Physics*. – 2020. – V. 128. – I. 11. – P. 115901-1-115901-8. DOI: 10.1063/5.0021212.
2. **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.
3. **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.
4. **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. 123515-1-123515-11. DOI: 10.1063/1.3670001.
5. **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.
6. **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.
7. **Малашенко, В.В.** Влияние наноразмерных дефектов на динамический предел текучести сплавов / В.В. Малашенко, Т.И. Малашенко // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 136-141. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.136.
8. **Malashenko, V.V.** The influence of collective effects on the concentration dependence of the yield stress of alloys under high-energy impacts / V.V. Malashenko // *Technical Physics Letters*. – 2020. – V. 46. – I. 9. – P. 925-927. DOI: 10.1134/S1063785020090242.
9. **Malashenko, V.V.** Dependence of dynamic yield stress of binary alloys on the dislocation density under high-energy impacts / V.V. Malashenko // *Physics of the Solid State*. – 2020. – V. 62. – I. 10. – P. 1886-1888. DOI: 10.1134/S1063783420100200.
10. **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.
11. **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.

References:

1. Kanel G.I., Savinykh A.S., Garkushin G.V., Razorenov S.V. Effects of temperature and strain on the resistance to high-rate deformation of copper in shock waves, *Journal of Applied Physics*, 2020, vol. 128, issue 11, pp. 115901-1-115901-8. DOI: 10.1063/5.0021212.
2. Batani D. Matter in extreme conditions produced by lasers, *Europhysics Letters*, 2016, vol. 114, no. 6, pp. 65001-p1-650001-p7. DOI: 10.1209/0295-5075/114/65001.
3. Lee J.H., Veyssset D., Singer J.P. et al. High strain rate deformation of layered nanocomposites, *Nature Communications*, 2012, vol. 3, art. no. 1164, 9 p. DOI: 10.1038/ncomms2166.
4. Smith R.F., Eggert J.H., Rudd R.E. et al. High strain-rate plastic flow in *Al* and *Fe*, *Journal of Applied Physics*, 2011, vol. 110, issue 12, pp. 123515-1-123515-11. DOI: 10.1063/1.3670001.
5. Yanilkin A.V., Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A.E. Dynamics and kinetics of dislocations in *Al* and *Al–Cu* alloy under dynamic loading, *International Journal of Plasticity*, 2014, vol. 55, pp. 94-107. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.09.008.
6. Tramontina D., Erhart P., Germann T. et al. Molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity in tantalum, *High Energy Density Physics*, 2014, vol. 10, pp. 9-15. DOI: 10.1016/j.hedp.2013.10.007.
7. Malashenko V.V., Malashenko T.I. Vliyanie nanorazmernykh defektov na dinamicheskij predel tekuchesti spлавov [The effect of nanoscale defects on the dynamic yield stress of alloys], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2020, issue 12, pp. 136-141. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.136. (In Russian).
8. Malashenko V.V. The influence of collective effects on the concentration dependence of the yield stress of alloys under high-energy impacts, *Technical Physics Letters*, 2020, vol. 46, issue 9, pp. 925-927. DOI:

10.1134/S1063785020090242.

9. Malashenko V.V. Dependence of dynamic yield stress of binary alloys on the dislocation density under high-energy impacts, *Physics of the Solid State*, 2020, vol. 62, issue 10, pp. 1886-1888. DOI: 10.1134/S1063783420100200.

10. Malashenko V.V. Dynamic drag of dislocation by point defects in near-surface crystal layer, *Modern Physics Letters B*, 2009, vol. 23, issue 16, pp. 2041-2047. DOI: 10.1142/S0217984909020199.

11. Malashenko V.V. Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects, *Physica B: Condensed Matter*, 2009, vol. 404, issue 21, pp. 3890-38932. DOI: 10.1016/j.physb.2009.07.122.

Original paper

SPECIFIC FEATURES OF INELASTIC PROCESSES IN MATERIALS WITH NANOSCALE DEFECTS

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/2021.13.272

Abstract: The high strain rate deformation of alloys containing Guinier-Preston zones under high-energy external influences has been theoretically analyzed. The analysis was carried out within the framework of the theory of dynamic interaction of structural defects. The investigated dissipation mechanism consists in the irreversible transfer of energy of an external impact into the energy of dislocation vibrations. An analytical expression for the dynamic yield stress taking into account all structural defects of the alloy has been obtained. It is shown that, under high-energy external influences, nanoscale defects affect the nature of the dependence of mechanical properties on the concentration of atoms of the second component. The dependence of the dynamic yield stress on the atomic concentration of the second component becomes nonmonotonic and has a minimum. Numerical estimates of the concentration corresponding to the minimum yield stress has been made. At this concentration value, a transition occurs from the dominance of the dislocation drag by the Guinier-Preston zones to the dominance of the drag by the atoms of the second component.

Keywords: high strain rate deformation, dislocations, Guinier-Preston zones, point defects, 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, Department of 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: 15.08.2021; после рецензирования/reviced: 15.09.2021; принята/accepted 21.09.2021.