

**SECTION 3. Nanotechnology. Physics.**

**Romanovskiy Sergey Aleksandrovich**

postgraduate student of the Department of General physics  
Altai state University named after I.I. Polzunov (Barnaul, Russia)

**Yashin Aleksandr Vyacheslavovich**

candidate of physical and mathematical Sciences,  
senior teacher of the Department of General physics  
Altai state University named after I.I. Polzunov (Barnaul, Russia)

**Pavlenko Svetlana Valeryevna**

chief expert,  
Territorial Department of Russia of the property in the Altai region,  
Barnaul, Russia

**THE STAGE OF THE QUASI-ELASTIC AND PLASTIC  
DEFORMATIONS IN NANO-FIBER  $\text{CuAu I}$  UNIAXIAL TENSILE  
STRAIN IN THE DIRECTION of  $\langle 100 \rangle$  AT A TEMPERATURE OF 10 K.**

*This article is devoted to the study of anisotropy of the alloys are not the cubic symmetry on the example of nanofibres  $\text{CuAu I}$  in the process of deformation at low temperatures.*

*Keywords: deformation, nano-fiber temperature.*

**СТАДИИ КВАЗИУПРУГОЙ И ПЛАСТИЧЕСКОЙ  
ДЕФОРМАЦИЙ В НАНОВОЛОКНЕ  $\text{CuAu I}$  ПРИ ОДНООСНОЙ  
ДЕФОРМАЦИИ РАСТЯЖЕНИЯ В НАПРАВЛЕНИИ  $\langle 100 \rangle$  ПРИ  
ТЕМПЕРАТУРЕ 10 К.**

*Настоящая статья посвящена вопросу изучения проявлений анизотропии сплавов некубической симметрии на примере нановолокна  $\text{CuAu I}$  в процессе деформации при низких температурах.*

*Ключевые слова: деформация, нановолокно, температура.*

**Введение**

В последние годы в мире резко возрос интерес к проблеме наноматериалов и наноиндустрии вследствие обнаруженного большого многообразия уникальных свойств, которые могут найти применение при конструировании и создании новых материалов. Среди групп наноструктур и наноматериалов выделяются нановолокна и нанотрубки.

Важная группа нановолокон представлена нановолокнами упорядоченных сплавов. Нановолокна будут находить всё новое применение при конструировании нанокомпозиционных материалов и создания новых видов наноматериалов с заданными свойствами. Основные исследования металлических нановолокон сосредоточены на изучении влияния конфигурации и структуры нановолокон на физические и физико-механические свойства. Настоящая статья посвящена вопросу изучения проявлений анизотропии сплавов некубической симметрии на примере нановолокна CuAu I в процессе деформации при низких температурах.

### Описание эксперимента

Эксперимент проводился на расчетном блоке, имитирующем трехмерное нановолокно CuAu I. Для расчета динамики атомной структуры был применен метод молекулярной динамики с использованием парных потенциалов Морзе [1]:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где  $D$  – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы,  $\alpha$  – параметр, определяющий жесткость межатомных связей,  $\beta = e^{\alpha r_0}$ ,  $r_0$  – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами. Взаимодействие между атомами ограничивалось тремя первыми координационными сферами. Время одной итерации при расчете методом молекулярной динамики равнялось  $10^{-14}$  с.

Применение потенциала Морзе хорошо себя оправдывает при исследовании большинства дефектов, образующихся в ходе структурно-энергетических превращений в процессе деформации. Имеется много исследований поведения дефектов различного рода с использованием данного потенциала как для двумерных моделей [2-6], так и трехмерных [7, 8]. Потенциал Морзе широко применяется при исследовании таких дефектов, как границы зерен [9-11] и антифазные границы [12], которые играют большую роль в процессах деформации интерметаллидов и упорядоченных сплавов [13-16].

На сегодняшний день проведены исследования стабильности сплавов меди и золота при различных температурах [17-19]. Параметры устойчивой кристаллической решетки сплава CuAu I, рассчитанные для температуры 10 К в работе [19], были использованы при моделировании нановолокна в настоящей статье ( $a = b = 0,3958$  нм,  $c = 0,3666$  нм).

Одноосная деформация растяжения расчетного блока нановолокна выполнялась по следующему алгоритму. В начале инициализировался блок в виде прямоугольного параллелепипеда с основанием в виде четырехугольника в плоскости  $\{100\}$ , высота параллелепипеда соответствует направлению  $\langle 100 \rangle$ . Размер расчетного блока нановолокна составлял 10368 атома, что соответствует упаковке из 24 атомов вдоль

грани в основании прямоугольного параллелепипеда ( $4,2352 \text{ нм} \times 4,7809 \text{ нм}$ ) и 36 атомов по его высоте ( $6,9611 \text{ нм}$ ). К расчетному блоку кристалла прикладываются свободные граничные условия в направлениях  $\langle 010 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$  и жесткие в направлении  $\langle 100 \rangle$ .

Динамическая одноосная деформация растяжения задавалась посредством поступательного смещения всех атомов, находящихся в пространстве между захватами (атомами составляющими жесткие границы), вдоль оси  $\langle 100 \rangle$  на  $0,002 \text{ нм}$  через  $10^{-13} \text{ с}$ , что соответствует скорости деформации  $3,48 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ . Компьютерный эксперимент выполнялся при температуре, соответствующей  $10 \text{ К}$ , которая задавалась через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. Для поддержания постоянной температуры применялся термостат Берендсена [20] с частотой коррекции скорости один раз в  $10^{-13} \text{ с}$ . Данный термостат применялся ранее при моделировании деформации нановолокон ГЦК металлов и сплавов в работах [21-23] и ГЦТ металлов в работе [24].

На любом этапе деформации предполагалась возможность последующего охлаждения расчетного блока до  $0 \text{ К}$ , посредством диссипации энергии за его пределы, с целью детального анализа произошедших в нем структурных изменений.

В процессе эксперимента для квазиупругой и пластической деформаций рассчитывалась запасаемая энергия, приходящаяся на отдельный атом в зависимости от времени. Был создан визуализатор трехмерного атомного расчетного блока кристалла с возможностью поворота и выделения атомных плоскостей в заданном направлении, позволяющий наблюдать эволюцию дефектной структуры на атомном уровне.

### **Результаты эксперимента**

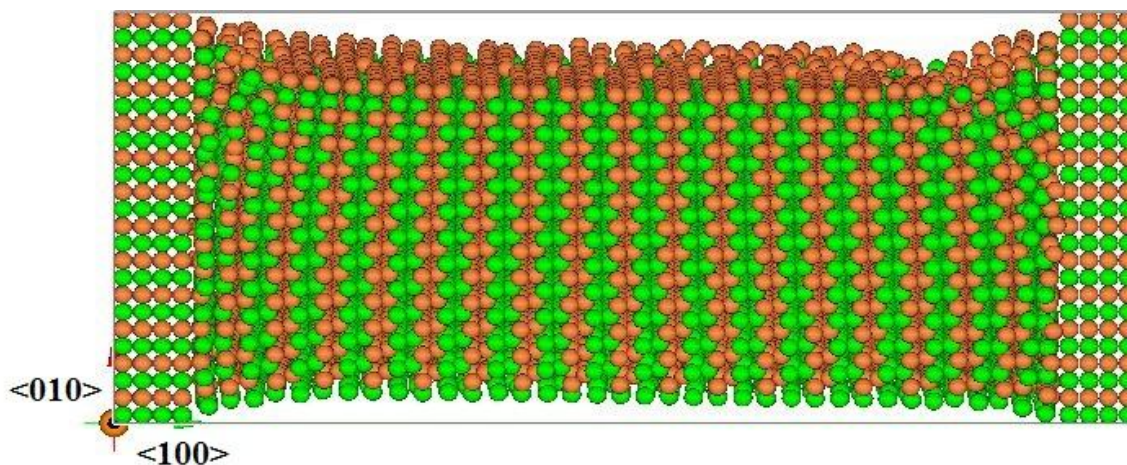
Для нановолокон  $\text{CuAu I}$  с ориентацией оси растяжения в направлении  $\langle 100 \rangle$  получена зависимость запасенной энергии деформации кристалла от времени растяжения. На данном графике можно выделить четыре основные этапа структурно-энергетических превращений: квазиупругая деформация, пластическая деформация, течение (образования шейки) и разрушение (рис. 1).



**Рисунок 1 - Изменение запасенной энергии деформации расчетного блока нановолокна CuAu I во время структурно-энергетических превращений в процессе деформации.**

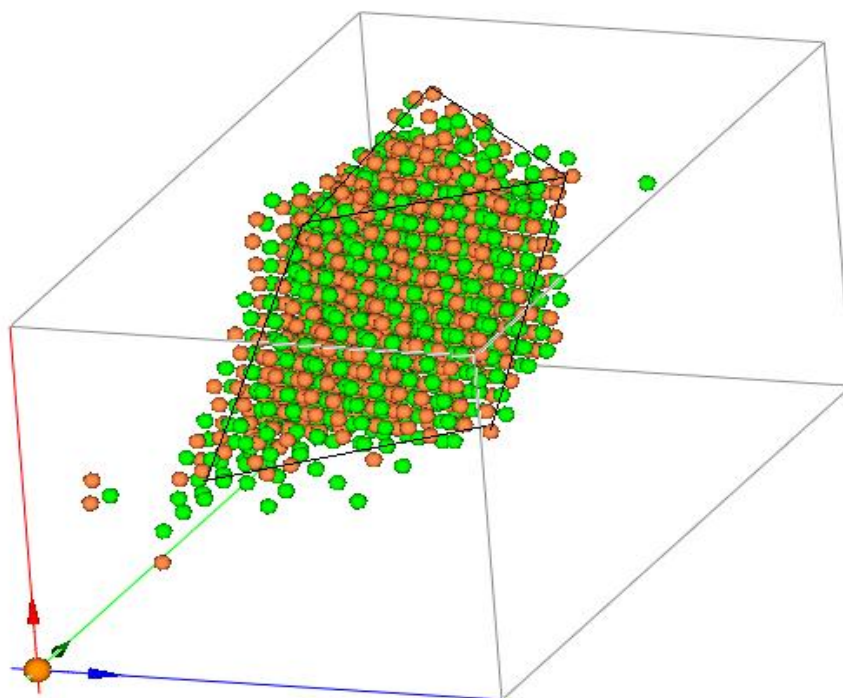
При квазиупругой деформации происходят небольшие смещения атомов и отсутствуют какие-либо дефекты.

Стадия квазиупругой деформации завершается через 79 пс в точке бифуркации энергии, что соответствует величине относительной деформации 24,6%. На этой стадии наблюдалось последовательное расщепление атомных плоскостей семейства  $\{100\}$  на моноатомные плоскости, наиболее интенсивно в центральной части, что привело к значительному удлинению нановолокна на первой стадии без появления признаков пластической деформации (рис. 3). К окончанию стадии расщепление плоскостей семейства  $\{100\}$  начинает происходить вблизи жестких захватов, что приводит к образованию трещины на границе раздела между абсолютно жесткими захватами и расчетным блоком нановолокна. В конце первой стадии деформации вблизи захватов регистрируются значительные атомные смещения. Напряжения на захватах достигает 8,4 ГПа.



**Рисунок 2 - Нановолокно CuAu I на 79 пс деформации.**

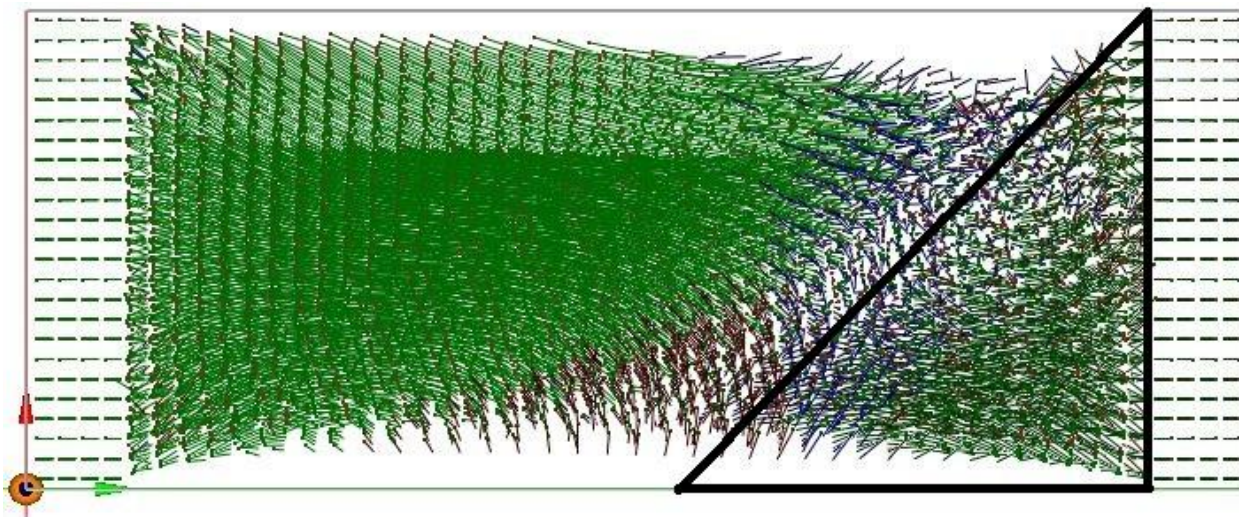
В начале второго этапа в период с 80 пс по 94 пс происходит смещение группы атомов. Сместившиеся атомы с 80 по 94 пс в направлении  $\langle 010 \rangle$  представляют собой форму треугольной призмы (рис. 3). Их часть от общего числа атомов - 11,77%.



**Рисунок 3 - Сместившиеся атомы с 80 по 94 пс в направлении  $\langle 010 \rangle$**

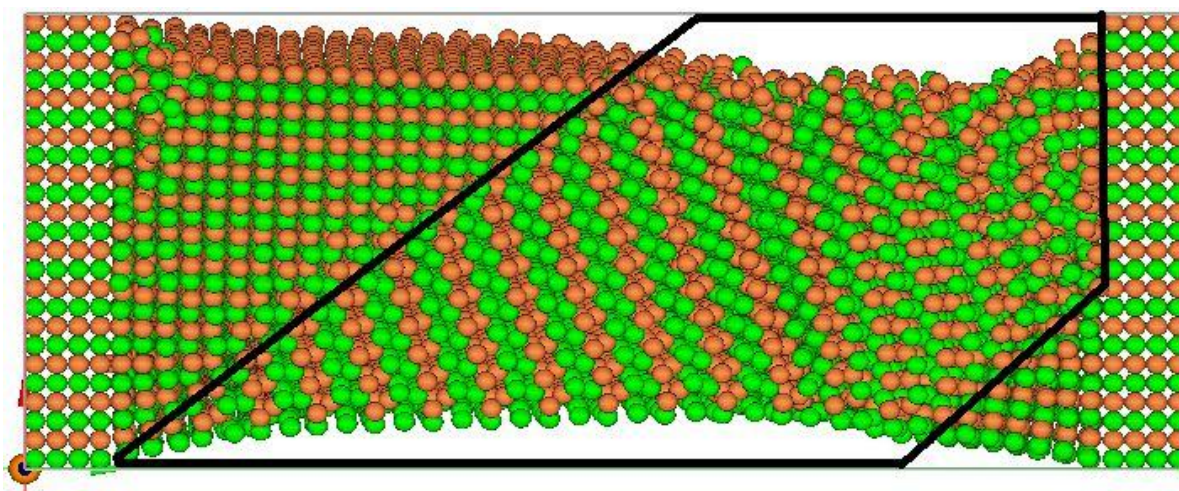
В этот же период можно наблюдать смещение атомов (рис. 4). Угол наклона смещений 45 градусов. В домене преобладают атомы с высокой энергией. Время жизни домена длится практически до окончания пластической деформации.

Промежуток времени от окончания квазиупругой деформации до выделения домена, который хорошо виден на 94 пс, соответствует понижению запасенной энергии из графика зависимости запасенной энергии. После того, как домен становится хорошо различимым, исходя от график, запасенная энергия начинает увеличиваться.



**Рисунок 4 - Смещение атомов нановолокна CuAu I с 80 пс до 94.**

В первой половине второго этапа деформации (пластической деформации) в период с 94 пс по 150 пс наблюдается поворот центральной части волокна. В центральной части выделяется домен видимый уже на 94 пс деформации (рис. 5).



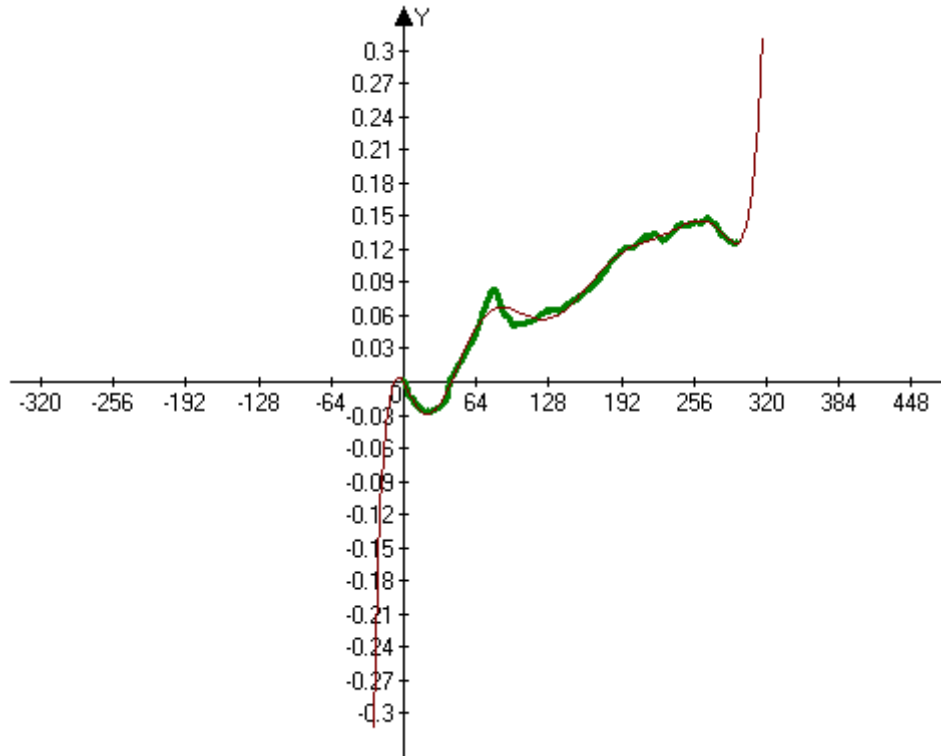
**Рисунок 5 - Домен в центральной части нановолокна CuAu I на 94 пс деформации.**

Дальнейшее течение второй стадии деформации наблюдается преимущественно на границах между образовавшимися доменами. В конце второй стадии на границе между доменами вблизи левого захвата образуется «шейка».

Вторая стадия завершается в 293 пс. Ее длительность составляет 214 пс Промежуток «квазиупругая деформация - пластическая деформация» на рис. 1 можно представить в виде закона зависимости энергии от времени, имеющим вид:

$$E_{1,2}(t) = 4.4878148 * 10^{-20} * t^9 - 6.1020558 * 10^{-17} * t^8 + 3.4407246 * 10^{-14} * t^7 - 1.0349482 * 10^{-11} * t^6 + 1.7714827 * 10^{-9} * t^5 - 1.6862452 * 10^{-7} * t^4 + 7.7947715 * 10^{-6} * t^3 - 9.5205288 * 10^{-5} * t^2 - 0.0015702 * t - 3.948525 * 10^{-4} (2)$$

Коэффициент корреляции составляет  $R^2 = 0.9908348$ .



**Рисунок 6 - График зависимости запасенной энергии деформации расчетного блока нановолокна CuAu I при квазиупругой и пластической деформации.**

На Рис. 6 изображенный график более широкой линией есть непосредственно результат компьютерного моделирования. По оси ординат откладывалась запасенная энергия деформации, по оси абсцисс – время. Линия с более узкой линией – график зависимости, построенный на данных значениях.

В результате проведенного исследования показана ориентационная анизотропия сплавов некубической симметрии на примере нановолокна CuAu I при низких температурах деформации. Для проверки результатов был применен математический анализ графика зависимости запасенной энергии деформации кристалла от времени растяжения с использованием корреляционно-регрессивного анализа (2). Данный, полученные из графика  $E_{1,2}(t)$  позволяют проанализировать поведение запасенной энергии деформации кристалла при протекании квазиупругой и пластической деформаций.

## Литература

1. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура антифазной границы и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой L12//Физика металлов и металловедение. 1984. Т. 58, Вып. 2. С. 336-343.
2. Дмитриев С.В., Козлов Э.В., Ломских Н.В., Старостенков М.Д. Изучение кинетики разупорядочения в рамках двумерной модели сплава//Изв. вузов. Физика. 1997. №3. С. 73-80.
3. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Механизмы диффузии по границам зерен в двумерных металлах//Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. вып.15. С. 44-48.
4. Андрухова О.В., Козлов Э.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д. О возможных механизмах атомного разупорядочения в бинарных сплавах//ФТТ. 1997. т.39. №8. С. 1456-1460.
5. Potekaev A.I., Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Mulyukov R.R., Pozhidaeva O.V., Starostenkov M.D. Localized modes in an A3B two-dimensional perfect crystal // Russian Physics Journal. 2008. - V. 51, № 8. - PP. 858-865.
6. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Пацева Ю.В. Исследование механизма самодиффузии в двумерных металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2004. - Т. 1, № 1. - С. 147-151.
7. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Вклады различных механизмов самодиффузии в ГЦК-металлах в условиях равновесия//Физика твердого тела. 2010. т.52. №6. С. 1075-1082.
8. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2005. - Т. 2, № 2. - С. 124-129.
9. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kustov S.L., Sverdlova E.G., Grakhov E.L. Computer modeling of grain boundaries in Ni3Al // Computational Materials Science. 1999. - V. 14, № 1-4. - PP. 146-151
10. Dem'yanov B.F., Kustov S.L., Starostenkov M.D. Computer simulation of the interaction of vacancies with the special tilt grain boundaries//Materials Science and Engineering: A. 2004. V.387-389. No.1-2. P. 738-742.
11. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Векман А.В. Малоугловые границы зерен в упорядоченном сплаве CuAu//Поверхность. 2000. №4. С. 54-58.
12. Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах. // Автореферат дисс. на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук в форме научного доклада. – Барнаул - АлтГТУ - 1994. - 86с.



13. Mulyukov R.R., Starostenkov M.D. Structure and Physical Properties of Submicrocrystalline Metals Prepared by Severe Plastic Deformation //Acta Metallurgica Sinica (English Letters). 2000. т.13. №1. С. 301.

14. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Сеница Н.В., Яшин А.В., Харина Е.Г., Кулагина В.В. Особенности структурной перестройки в нановолокне интерметаллида  $Ni_3Al$ , содержащего длиннопериодические парные термические антифазные границы, в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения в направлении  $\langle 001 \rangle$  // Известия высших учебных заведений. Физика. 2011. – Т. 54, №2. – С. 48-55.

15. Старостенков М.Д., Сеница Н.В., Яшин А.В. Структурная перестройка в нановолокне  $Ni_3Al$ , содержащем планарные неконсервативные антифазные границы, при высокоскоростной одноосной деформации растяжения//Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2010. Т. 15. № 3-1п. С. 1072-1073.

16. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Сеница Н.В., Яшин А.В., Хорошилов Д.Е. Механизмы структурной перестройки в модели нановолокна интерметаллида  $Ni_3Al$ , содержащего длиннопериодические антифазные границы, в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения // Известия высших учебных заведений. Физика. 2010. – Т. 53, № 8. – С. 47-54.

17. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Попова Л.А. Термоактивируемые перестройки структуры бинарного сплава  $Cu_3Au$  при отклонении стехиометрического состава// Известия высших учебных заведений. Физика. 2008. - Т. 51, № 10. - С. 53-63.

18. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Мясниченко В.С. Термоактивируемые перестройки структуры бинарного сплава  $CuAu$  при отклонении от стехиометрического состава//Известия высших учебных заведений.Физика. 2010.-Т.53, № 3.- С. 3-13.

19. Попова Л.А. Исследование атомных механизмов структурных и сверхструктурных превращений в сплаве  $CuAu$  I //Автореф. дисс. на соиск. уч. ст. к. ф.-м. н. Барнаул.-2008.-20 с.

20. Berendsen H.J.C., et al. Molecular-dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. - 1984. – V. 81, № 8, P. 3684-3690.

21. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е. Исследование процессов атомной перестройки в нановолокне сплава  $Ni_3Al$  подвергнутого одноосной деформации растяжения в направлении  $\langle 110 \rangle$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2009. – Т. 6, №1. - С. 74-80.

22. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., Сеница Н.В. Исследование структурных превращений в сплаве  $Ni_3Al$  под действием

одноосной деформации растяжением // Деформация и разрушение материалов. 2009. - № 6. - С. 28-31.

23. Старостенков М. Д., Яшин А. В., Дудник Е. А. и др. // Перспективные материалы. -2009. -№ 7. -С. 383-388.

24. Яшин А.В., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Сеница Н.В., Мясниченко В.С., Сосков А.А. Структурная перестройка в нановолокне CuAu I при одноосной деформации растяжения в направлении  $\langle 001 \rangle$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т. 10. № 1. С. 93-97.

25. Яшин А.В., Сеница Н.В., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. Процессы атомной перестройки при динамическом растяжении // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2008. – Т. 5, №1. - С. 16-20.

26. Яшин А.В., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Исследование участков сверхструктурных разрушений при одноосной деформации в сплаве  $Ni_3Al$  // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения. 2008. Т. 8. № 4. С. 160-163.

---

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 12-02-31135 мол\_а.

---