

# ПРОЦЕССЫ НАНОМАСШТАБНОГО ИДЕАЛЬНОГО ПЛАСТИЧЕСКОГО СДВИГА В ДЕФОРМИРУЕМЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ И НАНОПРОВОЛОКАХ

С.В. Бобылев<sup>1,2,3\*</sup>, И.А. Овидько<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, 195251, Россия

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 198504, Россия

<sup>3</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Россия

\*e-mail: bobylev.s@gmail.com

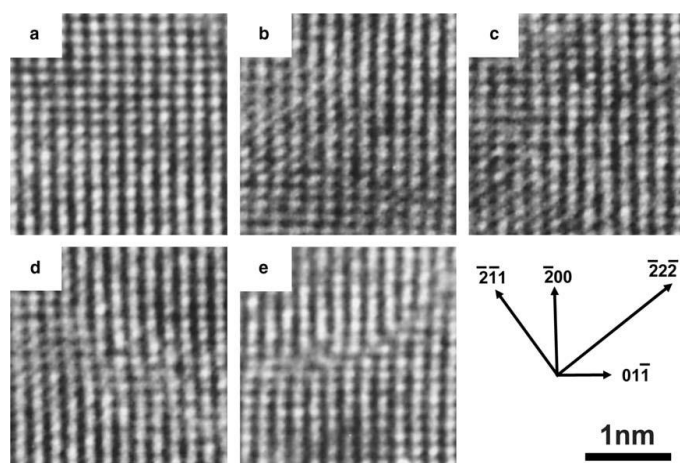
**Аннотация.** В настоящем обзоре представлены теоретические модели пластической деформации материалов, базирующиеся на концепции наномасштабного идеального сдвига (нановозмущения), представляющего собой альтернативу стандартному механизму зарождению решеточных дислокаций. Рассмотрена модель нового физического механизма пластического течения в ГЦК нанопроволоках, связанного с образованием и эволюцией приповерхностных нановозмущений, а также теоретически исследована их роль в генерации наномасштабных деформационных двойников. Предложена модель испускания решеточных и зернограничных дислокаций порами в нанокристаллических материалах путем наномасштабного идеального сдвига при реалистичных значениях приложенного напряжения.

## 1. Введение

В настоящем обзоре рассматриваются теоретические модели пластической деформации, базирующиеся на концепции наномасштабного идеального пластического сдвига или, по-другому, нановозмущения, впервые предложенной в работе Гуткина и др. [1] в связи с исследованием пластических свойств специальных титановых сплавов, называемых Гам-металлами. Особенностью деформированной микроструктуры этих сплавов является наличие возмущений кристаллической решетки в виде планарных дефектов, представляющих собой наноскопические области локализованного в отдельных атомных плоскостях сдвига (см. рис. 1), при видимом отсутствии подвижных решеточных дислокаций [1–4]. Авторы [1] развили теорию, согласно которой нановозмущения играют ключевую роль в деформации Гам-металлов как альтернативный источник подвижных дислокаций (в изначальном варианте диполей дислокаций).

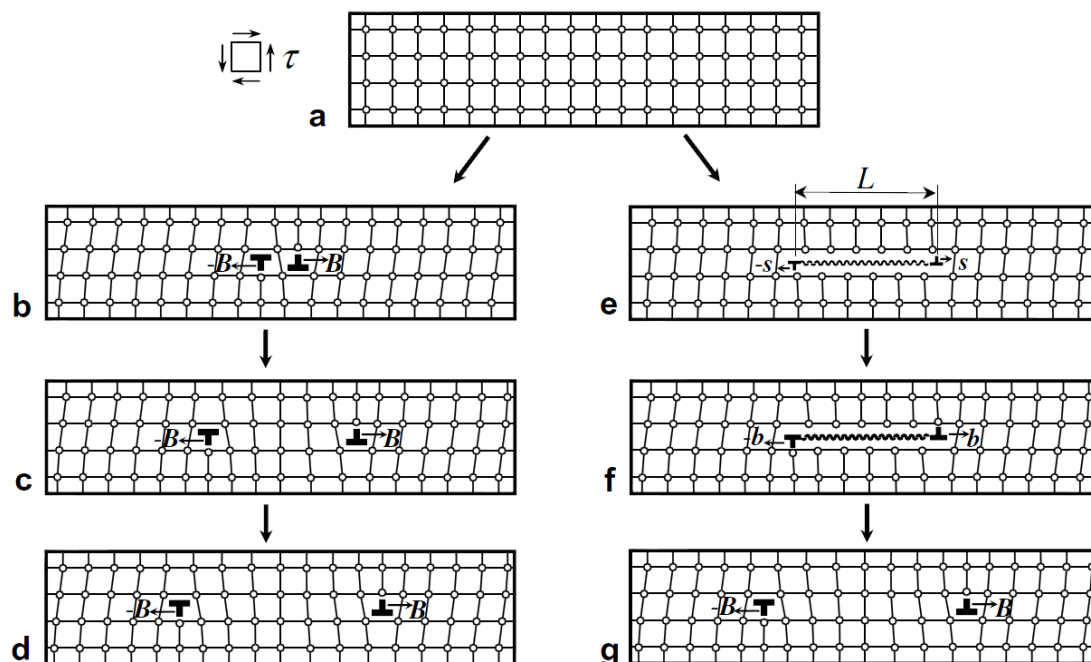
Схема механизма представлена на рис. 2. На рис. 2а показан фрагмент кристаллической структуры материала, изначально свободный от дефектов. Серия рис. 2b–d иллюстрирует классическое гомогенное зарождение диполя совершенных решеточных дислокаций. В свою очередь серия рис. 2e–g демонстрирует механизм наномасштабного идеального пластического сдвига (нановозмущения), суть которого сводится к следующему. На определенном участке атомной плоскости длиной  $L$  происходит скоррелированный сдвиг небольшой величины  $s$  ( $0 < s \leq B$ , где  $B$  –

величина вектора Бюргерса совершенной решеточной дислокации) (рис. 2е). При этом формируется дефектная структура, которую авторы [1] назвали нановозмущением, представляющая собой диполь частичных некристаллографических дислокаций, ограничивающих область сдвига (фактически это дислокации в смысле Вольтерра, как они понимаются в континуальной теории упругости) и разделенных так называемым обобщенным дефектом упаковки. В теории кристаллов обобщенный дефект упаковки определяется как плоский дефект, образование которого может быть представлено как процесс, при котором идеальный кристалл разрезается вдоль некоторой атомной плоскости на две части, части сдвигаются друг относительно друга на произвольный вектор  $\mathbf{s}$ , лежащий в плоскости разреза, и объединяются вновь (см., например, [5, 6]). Стандартный дефект упаковки является частным случаем (стабильной конфигурацией) обобщенного, который реализуется при определенном (задаваемом кристаллографией материала) значении сдвига  $\mathbf{s}$ . В дальнейшем сдвиг  $\mathbf{s}$  нарастает и может достигать величины частичного вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$  (рис. 2ф), при котором некристаллографические дислокации трансформируются в решеточные частичные дислокации, а обобщенный дефект упаковки – в стандартный. В финале, когда  $\mathbf{s}$  достигает величины решеточного вектора Бюргерса  $\mathbf{B}$ , дислокации трансформируются в совершенные, а обобщенный дефект упаковки исчезает. При этом формируется структура полностью идентичная гомогенному зарождению решеточных дислокаций (рис. 2д).



**Рис. 1.** Электронные микрофотографии образца Гам-металла после деформации штамповкой на 90%. Фотографии демонстрируют возмущенные области кристаллической структуры. Воспроизведено из [1] с разрешения Elsevier.

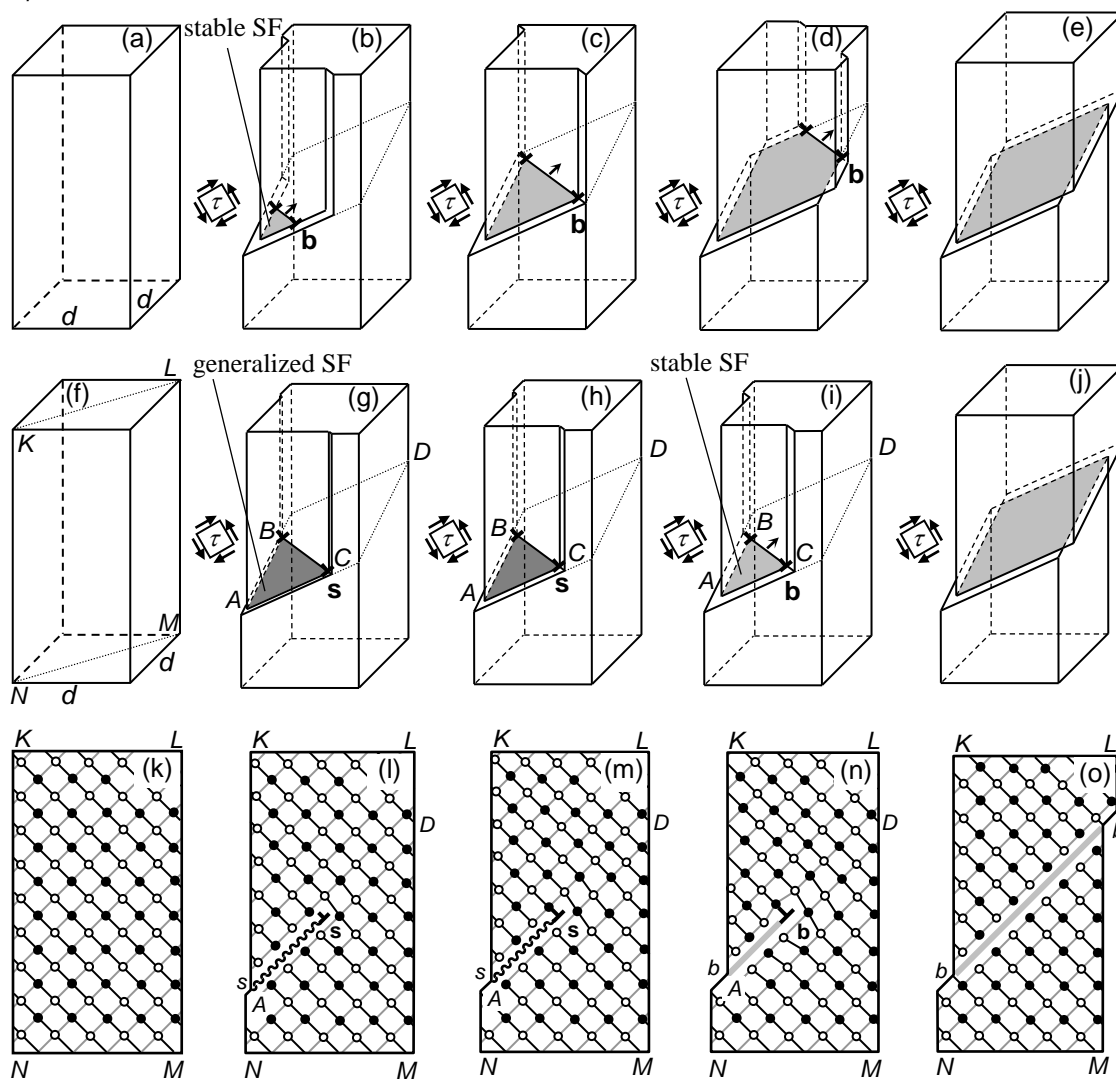
Описанный механизм представляет собой, по сути, процесс идеального пластического сдвига, про который хорошо известно (см., например, [7]), что он может реализовываться при исключительно высоких значениях сдвигового напряжения ( $\sim G/10$ , где  $G$  – модуль сдвига). Применительно к Гам-металлам [1] эффективность данного механизма обусловлена существенной анизотропией упругих свойств, выражающейся в наличии так называемых "упруго ослабленных" кристаллографических направлений, в которых значение модуля сдвига крайне низко ( $\sim 9$  ГПа), что обеспечивает работоспособность механизма нановозмущений при реально достижимых напряжениях. Однако в многих наноструктурных материалах реально достижимы очень высокие напряжения близкие к теоретической прочности кристалла. Другим примером материалов, где достижимы экстремально высокие уровни напряжений – монокристаллические нанопроволоки, которые рассматриваются в параграфе 2 настоящей статьи.



**Рис. 2.** (a)–(d) Иллюстрация стандартного гомогенного зарождения и движения диполя совершенных решеточных дислокаций. (e)–(g) Генерация того же диполя совершенных решеточных дислокаций посредством механизма наномасштабного идеального пластического сдвига (нановозмущение). Воспроизведено из [4] с разрешения Elsevier.

## 2. Наномасштабный пластический сдвиг в деформируемых нанопроволоках

В последние годы значительное внимание уделяется эволюции дефектов и физическим механизмам пластической деформации в проволоках нано- и микромасштабного размера (нанопроволоках) по причине уникальных механических и физических свойств [8–20]. Особый интерес вызывает так называемый размерный эффект: существенный рост прочности при уменьшении диаметра нанопроволоки. Например, в экспериментах [8–12] металлические ГЦК проволоки, имеющие диаметр 200–500 нм, под действием сжимающих напряжений демонстрировали прочность в 10–50 раз превосходящую таковую для массивных образцов того же химического состава. Также эти проволоки обычно демонстрируют ярко выраженное механическое упрочнение в процессе пластической деформации. Экспериментальные данные [8–12] вместе с эффектом упрочнения находят логичное объяснение в идее дислокационного обеднения (dislocation starvation), предложенной Грир и Никс [9, 10]. В рамках этого объяснения изначально существующие дислокации быстро выходят и исчезают на свободных поверхностях на первой стадии деформации. Как следствие, к концу первой стадии нанопроволока оказывается свободной от дислокационных дефектов. А вторая стадия пластической деформации протекает при очень высоких механических напряжениях, необходимых для деформирования свободной от дефектов нанопроволоки. Также в экспериментах [18, 20] была продемонстрирована исключительно высокая прочность (близкая к теоретической) бездислокационных металлических нанопроволок с размером поперечного сечения от 75 до 1000 нм. Компьютерное моделирование [13,14] пластического течения в изначально бездефектных нанопроволоках показало, что дислокации могут зарождаться на свободных поверхностях в процессе механического нагружения. В проволоках с квадратным или прямоугольным сечением углы (ребра) являются местами предпочтительного зарождения дислокаций [14]. Помимо этого компьютерное моделирование [15] показало возможность зарождения наномасштабных деформационных двойников в монокристаллических медных нанопроволоках.



**Рис. 3.** Механизмы пластической деформации в нанопроволоках. (a–e) Стандартное скольжение частичной дислокации. (a) Начальное состояние. (b–e) Обычная частичная дислокация с вектором Бюргерса  $b$  зарождается на свободной поверхности нанопроволоки (где образуется ступенька шириной  $b$ ) и скользит по направлению к противоположной свободной поверхности. Стабильный дефект упаковки соединяет дислокацию со свободной поверхностью, на которой она зародилась. (f–j) Режим деформации путем зарождения и роста нановозмущений (трехмерный вид). (f) Начальное состояние. (g) и (h) Зарождается некристаллографическая частичная дислокация, модуль вектора Бюргерса  $s$  которой непрерывно возрастает. Между дислокацией и свободной поверхностью (ступенькой на поверхности) формируется обобщенный дефект упаковки (серая область), который эволюционирует с ростом  $s$ . (i) Некристаллографическая частичная дислокация трансформируется в обычную частичную дислокацию (когда  $s$  достигает величины  $b$  вектора Бюргерса обычной частичной дислокации) и двигается по направлению к свободной поверхности. (j) Финальная структура со ступеньками шириной  $b$  на свободных поверхностях. (k)–(o) Двухмерный вид деформационного режима с нановозмущениями в кристаллографической плоскости (содержащей линию скольжения  $AD$ ) нанопроволоки. Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

В работах [21, 22] нами был предложен новый механизм пластической деформации бездефектных нанопроволок, который подробно излагается ниже. Этот

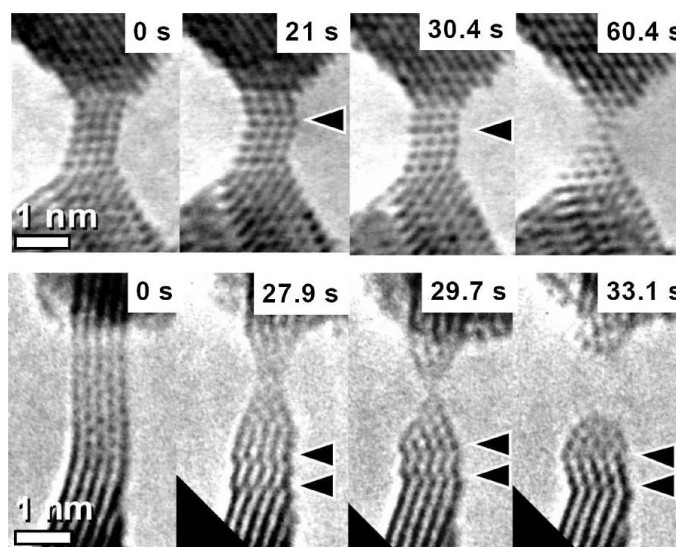
механизм представляет собой зарождение приповерхностных нановозмущений – наноскопических областей идеального пластического сдвига с малыми смещениями – в деформируемых монокристаллических нанопроволоках. Деформационное зарождение изолированных дефектов упаковки в нанопроволоках экстремально малого размера без помощи классических дислокаций впервые было теоретически предсказано в работе [21]. Это предсказание косвенно поддержано экспериментальными наблюдениями [23, 24] изолированных дефектов упаковки в золотых нанопроволоках с поперечными размерами 5 нм и менее. Ниже дается теоретическое описание нового режима пластической деформации посредством зарождения и роста нановозмущений в бездефектных ГЦК нанопроволоках с учетом роли углов (граней) в инициации пластического сдвига. Также теоретически описывается роль нановозмущений, формирующихся последовательно в соседних атомных плоскостях, как зародышей деформационных двойников.

**Геометрия механизма нановозмущений в ГЦК нанопроволоках.** Рассмотрим процесс пластической деформации в монокристаллической ГЦК нанопроволоке, имеющей форму вытянутого параллелепипеда с квадратным сечением  $d \times d$  (рис. 3а). В случае если нанопроволока изначально не содержит дефектов, пластическое течение может осуществляться путем стандартного зарождения решеточных дислокаций на свободной поверхности и их скольжения в некотором сечении нанопроволоки (рис. 3а–е) [13, 14]. В работах [21, 22], однако, был предложен альтернативный путь, заключающийся в формировании приповерхностных нановозмущений, наноскопических областей идеального пластического сдвига с малыми смещениями (рис. 3f–j).

Обсудим геометрические особенности нового механизма. Они проиллюстрированы на трехмерном виде фрагмента нанопроволоки, находящейся под действием растягивающего напряжения (рис. 3f–j), и на двухмерном виде сечения  $KLMN$  (рис. 3f) нанопроволоки, показанном на рис. 3k–o. В ГЦК нанопроволоках сдвиг, а, следовательно, и зарождение нановозмущений, осуществляется в плоскости типа  $\{111\}$ . На начальном этапе приложенное напряжение вызывает мгновенный идеальный сдвиг, характеризующийся малой величиной  $s$ , в фрагменте  $ABC$  плоскости скольжения. Этот сдвиг приводит к формированию обобщенного дефекта упаковки  $ABC$  наноскопического размера (рис. 3g и 3l). Внутри нанопроволоки обобщенный дефект упаковки ограничен некристаллографической частичной дислокацией  $BC$  с вектором Бюргерса  $s$  (рис. 3g и 3l), модуль которого мал ( $s < b$ , где  $b$  – вектор Бюргерса обычной кристаллографической частичной дислокации). Всю эту совокупность дефектов мы называем нановозмущением [21,22]. На следующем этапе деформации величина  $s$  непрерывно возрастает (рис. 3h и 3m). Параллельно некристаллографическая дислокация может двигаться. Когда величина  $s$  сравнивается с  $b$  нановозмущение трансформируется в обычную частичную дислокацию, соединенную стандартным дефектом упаковки (обобщенный дефект упаковки в состоянии с минимальной энергией)  $ABC$  со свободной поверхностью (рис. 3j и 3o). Затем частичная дислокация двигается к свободной поверхности, где она исчезает, оставляя после себя обычный дефект упаковки (рис. 3j и 3o).

Изолированные дефекты упаковки (в отсутствии дислокаций) экспериментально наблюдались [23, 24] в золотых нанопроволоках с поперечными размерами 5 нм и менее (рис. 4). Эти эксперименты косвенно поддерживает предлагаемую концепцию нановозмущений как потенциальных носителей пластической деформации в металлических нанопроволоках. Помимо этого, приповерхностные нановозмущения в нанопроволоках (рис. 3g–i и 3l–n) подобны нановозмущениям, экспериментально наблюдавшимся [25] методами электронной микроскопии внутри зерен специальных

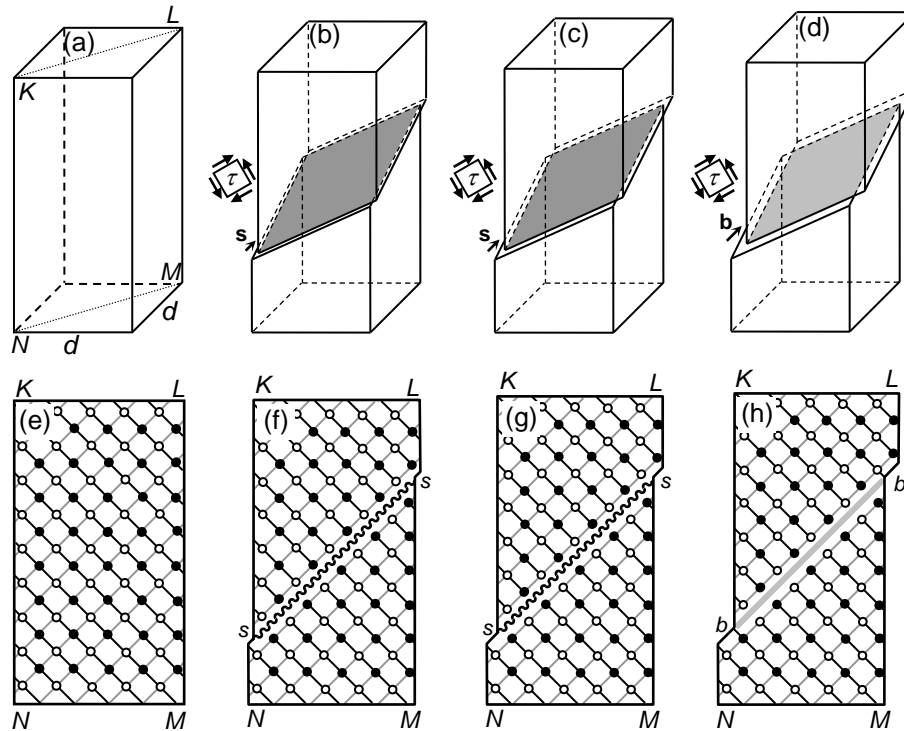
титановых сплавов (Гам-металлов) в процессе пластической деформации. В Гам-металлах нановозмущения ограничены петлями некристаллографических частичных дислокаций и зарождаются за счет высоких напряжений и низких значений некоторых упругих констант [1, 4, 25, 26]. Как показано ниже, образование приповерхностных нановозмущений является особым режимом деформации в нанопроволоках, причиной которого являются наномасштабные и поверхностные эффекты. Эти эффекты приводят к экранированию полей напряжений нановозмущений, что облегчает их зарождение.



**Рис. 4.** Микрофотографии деформированных растяжением вдоль направления  $[1\ 1\ 0]$  золотых нанопроволок. Стрелками показаны планарные дефекты. Воспроизведено из [24] с разрешения American Physical Society.

Сун и др. [27] экспериментально исследовали наномасштабные деформационные процессы в одиночных нанокристаллах приблизительно сферической формы. Эксперименты показали, что пластическая деформация в кристаллах золота и платины в широком диапазоне температур контролируется быстрыми сдвиговыми явлениями. Эти быстрые сдвиги приводят к формированию стабильных дефектов упаковки, наблюдаемых экспериментально. В общем случае, такие дефекты упаковки могут образовываться за счет либо скольжения короткоживущих частичных дислокаций, либо деформации путем зарождения и роста нановозмущений. Однако на практике дислокации в деформируемых нанокристаллах не наблюдались [27]. Для идентификации деформационных механизмов Сун и др. [27] провели серию симуляций методами молекулярной динамики. Результаты компьютерного моделирования показали, что нанокристаллы платины деформируются либо путем скольжения короткоживущих дислокаций или путем мгновенного гомогенного сдвига в зависимости от температуры и приложенного напряжения. Последний механизм фактически является механизмом нановозмущений в предельном случае, когда нановозмущение занимает все поперечное сечение образца (рис. 5). Т.е. нановозмущение состоит только из обобщенного дефекта упаковки без некристаллографических дислокаций и создает ступеньки на свободной поверхности (рис. 5).

Таким образом, предлагаемая модель косвенно подтверждается упомянутыми выше экспериментами [23,24] по пластической деформации золотых (Au) нанопроволок, экспериментами [25] по деформации Гам-металлов и результатами моделирования [27] пластического течения методами молекулярной динамики в одиночных нанокристаллах сфероидальной формы.



**Рис. 5.** Режим деформации посредством нановозмущений в предельном случае, когда нановозмущение занимает все сечение нанопроволоки. В этом случае нановозмущение образовано только обобщенным дефектом упаковки (без некристаллографических дислокаций). Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

**Энергетические и силовые характеристики механизма нановозмущений в ГЦК нанопроволоках.** Рассчитаем энергетические характеристики нового и обычного режимов пластической деформации в нанопроволоках на примере модельной конфигурации, показанной на рис. 3. В рамках модели нанопроволока находится под действием постоянной растягивающей нагрузки. Пластический сдвиг происходит в плоскости типа  $\{111\}$ , ориентированной под углом  $\arccos(1/\sqrt{3})$  относительно плоскости основания нанопроволоки (предполагается, что нанопроволока ограничена плоскостями типа  $\{100\}$ ), под действием сдвигового напряжения  $\tau$ , действующего в этой плоскости. Нанопроволока полагается упруго изотропным твердым телом, характеризующимся модулем упругости  $G$  и коэффициентом Пуассона  $\nu$ .

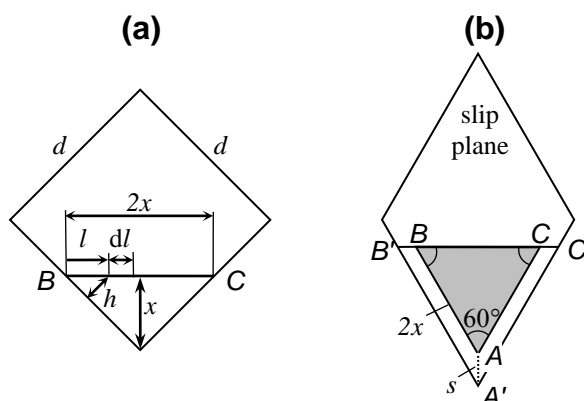
Новый режим деформации (рис. 3g–i и 3l–n) характеризуется изменением энергии  $\Delta W_n$ , связанным с образованием нановозмущения. Изменение энергии  $\Delta W_n$  (разность энергий нанопроволоки с нановозмущением и бездефектной нанопроволоки) является суммой четырех слагаемых:

$$\Delta W_n = W_d + W_s + W_{gsf} - A, \quad (1)$$

где  $W_d$  – собственная энергия дислокации (в расчете на единицу длины),  $W_s$  – поверхностная энергия, связанная с образованием ступенек на свободной поверхности в результате пластического сдвига в сечении нанопроволоки,  $W_{gsf}$  – энергия обобщенного дефекта упаковки,  $A$  – работа пластической деформации.

Рассчитаем собственную энергию  $W_d$  дислокации в нанопроволоке (рис. 3). Линия дислокации ВС ориентирована вдоль направления  $[110]$  и перпендикулярно сечению  $KLMN$  (рис. 3f). На рис. 3a изображено сечение (квадрат) нанопроволоки параллельное ее основанию и содержащее линию дислокации. Будем полагать, что

высота нанопроволоки много больше поперечного размера  $d$ . Тогда можно приближенно считать нанопроволоку параллелепипедом бесконечной высоты. В этом случае пространственное положение дислокации однозначно задается расстоянием  $x$  между линией дислокации и углом нанопроволоки (рис. 6а). Длина  $BC$  при этом равна  $2x$ . Аналитическое выражение для энергии дислокации, линия которой не параллельна свободной поверхности в нанопроволоке с квадратным сечением, не может быть получена. В тоже время хорошо известно [28], что свободные поверхности эффективно экранируют дислокационные поля напряжений. Соответственно используем следующее стандартное приближение [29–31] для оценки энергии  $W_d$ . Разобьем линию дислокации на сегменты бесконечно малой длины  $dl$ . Далее предположим, что энергия каждого такого сегмента зависит только от расстояния до ближайшей свободной поверхности, полностью аналогично тому, как это имеет место для бесконечно длинной дислокации параллельной свободной поверхности. Т.е. мы полагаем, что энергия каждого сегмента равна  $dW = (Ds^2/2)\ln(h/s)dl$ , где  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ ,  $s$  – вектор Бюргерса дислокации, который также выступает в роли радиуса ядра дислокации [28],  $h$  – расстояние между сегментом дислокации и ближайшей свободной поверхностью. Величина  $h$  фактически является радиусом экранирования дислокационных полей напряжений в духе стандартной формулы [28] для собственной энергии  $= (Ds^2/2)\ln(R/r_0)$  краевой дислокации с модулем вектора Бюргерса  $s$ , радиусом ядра  $r_0$  и радиусом экранирования  $R$ .



**Рис. 6.** Геометрия краевой дислокации в нанопроволоке. (а) Сечение нанопроволоки, параллельное основанию нанопроволоки и содержащее линию дислокации  $BC$ . (б) Плоскость скольжения дислокации  $BC$ . Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

Так как дислокация не параллельна свободной поверхности, расстояние  $h$  различно для разных точек дислокационной линии. Для бесконечно малого фрагмента дислокационной линии  $dl$ , удаленного на расстояние  $l$  от точки  $B$  (см. рис. 6а),  $h$  задается формулой:

$$h = \begin{cases} l/\sqrt{2}, & \text{if } l \leq x, \\ (2x-l)/\sqrt{2}, & \text{if } l > x. \end{cases} \quad (2)$$

С учетом формулы (2) после интегрирования упругой энергии  $dW = (Ds^2/2)\ln(h/s)dl$ , мы находим искомую собственную энергию дислокации:

$$W_d = W_c + \frac{Ds^2}{2} \int_{s\sqrt{2}}^{2x-s\sqrt{2}} \ln \frac{h(l)}{s} dl = Ds^2 \left[ x \ln \frac{x}{s\sqrt{2}} + s\sqrt{2} \right]. \quad (3)$$



Здесь  $W_c$  – энергия ядра дислокации, задаваемая как  $W_c = Ds^2x$  [28]. Величина  $s\sqrt{2}$  в пределах интегрирования служит в данном случае параметром «обрезания», поскольку участки дислокации расположенные на расстояниях  $l < s\sqrt{2}$  и  $2x - s\sqrt{2} < l < 2x$  от точки В одновременно находятся на расстоянии  $< s$  от свободной поверхности, т.е. на расстоянии меньше радиуса ядра дислокации. Поэтому они должны быть “вырезаны” при интегрировании. Формула (3) справедлива в диапазоне  $s\sqrt{2} \leq x < d/\sqrt{2}$ ; при  $x > d/\sqrt{2}$  энергия будет аналогичным образом зависеть от расстояния  $d/\sqrt{2} - x$  до противоположного угла нанопроволоки. Можно представить формулу (3) в общем виде, справедливом в диапазоне значений  $s\sqrt{2} \leq x \leq (d - s)\sqrt{2}$ :

$$W_d = Ds^2 \left[ \min(x, d\sqrt{2} - x) \ln \frac{\min(x, d\sqrt{2} - x)}{s\sqrt{2}} + s\sqrt{2} \right]. \quad (4)$$

Энергия  $W_{gsf}$  обобщенного дефекта упаковки и работа  $A$  задаются как

$$W_{gsf} = \gamma_{gsf}(s)S, \quad A = \tau S. \quad (5)$$

Здесь  $\gamma_{gsf}(s)$  удельная плотность энергии (на единицу площади) обобщенного дефекта упаковки ( $\gamma_{gsf}$  является функцией  $s$ ), а  $S$  – площадь фрагмента  $ABC$  плоскости скольжения (см. рис. 3 и 6b). Учитывая геометрию  $ABC$  (рис. 6b) площадь записывается как

$$S = \begin{cases} x^2\sqrt{3}, & \text{при } x \leq d/\sqrt{2}, \\ [d^2 - (d\sqrt{2} - x)^2]\sqrt{3}, & \text{при } x > d/\sqrt{2}. \end{cases} \quad (6)$$

Энергия  $W_s$  ступенек на свободной поверхности нанопроволоки, очевидно, равна

$$W_s = \gamma_s S_{step}, \quad (7)$$

где  $\gamma_s$  – удельная плотность поверхностной энергии (на единицу площади),  $S_{step}$  – суммарная площадь ступенек. На рис. 6b схематично изображено поперечное сечение нанопроволоки в плоскости скольжения, из которого видно, что ступеньки имеют форму трапеций ( $ABB'A'$  и  $ACC'A'$ ). Их площадь приближенно записывается как

$$S_{steps} \approx 2xs. \quad (8)$$

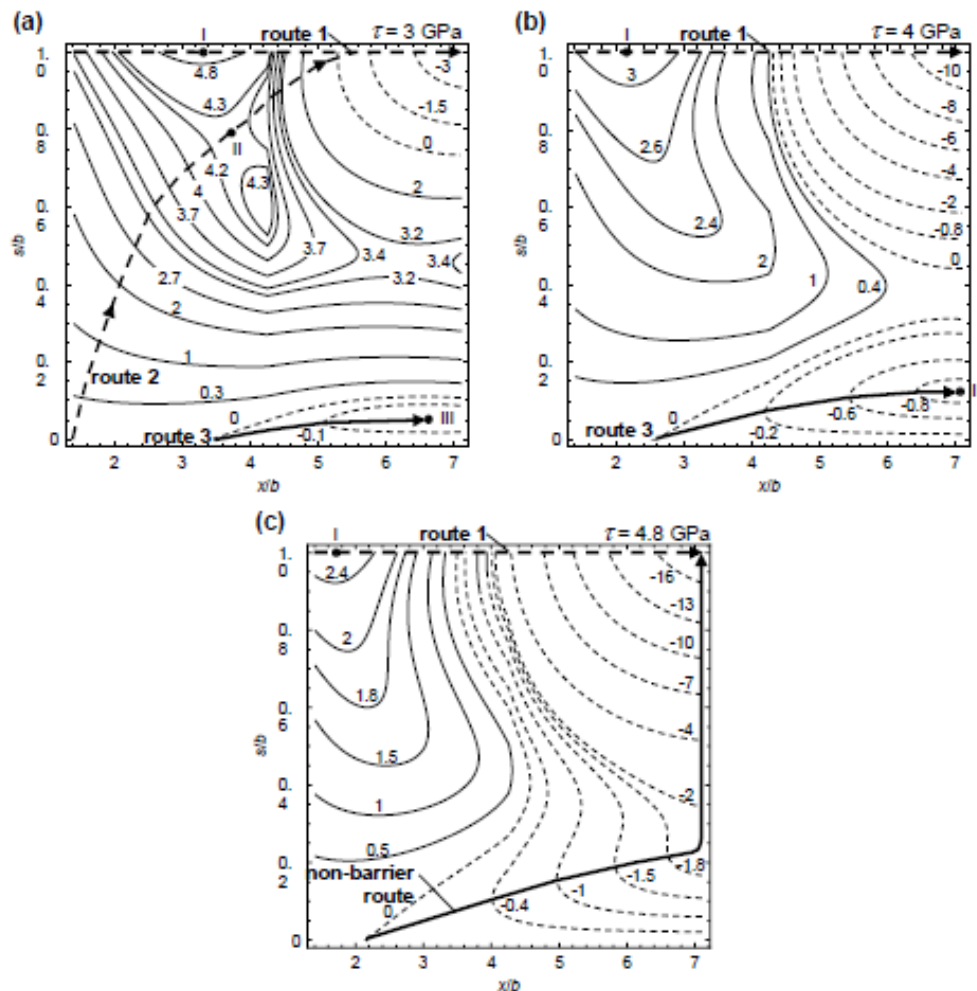
Формулы (1), (2), (4)–(8) позволяют найти изменение энергии  $\Delta W_n(x, s)$  как функцию переменных  $x$  и  $s$  в интервалах значений  $b\sqrt{2} < x < (d - b)\sqrt{2}$  и  $0 < s \leq b$  соответственно.

Изменение энергии  $\Delta W_n(x, s)$  характеризует зарождение и эволюцию нановозмущения. При  $s = b$  формула (1) трансформируется в выражение для изменения энергии, характеризующее классическое зарождение и скольжение частичной решеточной дислокации. Соответственно, анализ выражения (1) позволяет одновременно рассчитать энергетические характеристики как нового, так и классического режимов деформации, и определить оптимальный путь эволюции системы. Ниже выполнен такой анализ на примере золотой (Au) нанопроволоки, для которой типичны следующие значения параметров:  $G = 27$  ГПа,  $\nu = 0.44$ , и  $\gamma_s = 1.48$  Дж/м<sup>2</sup> [28]. В качестве скользящей решеточной дислокации выбрана краевая дислокация Шокли с вектором Бюргерса  $b = 0.166$  нм. Зависимость  $\gamma_{gsf}(s)$  энергии

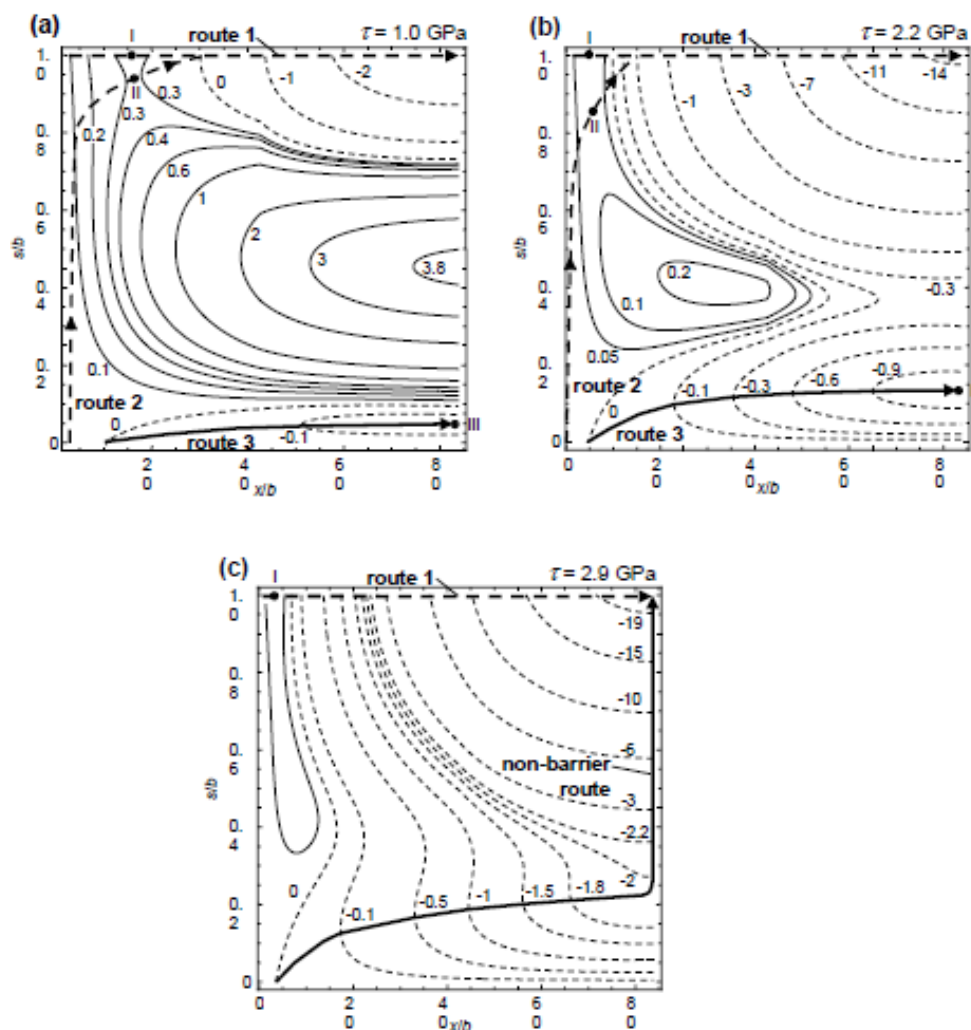
обобщенного дефекта упаковки в Au была найдена в результате компьютерного моделирования в работе [32]. Используя результаты [32], эта зависимость может быть аппроксимирована в следующем виде:

$$\gamma_{gsf}(s/b) = \begin{cases} \frac{\gamma_{us}}{2} \left( 1 - \cos \frac{2\pi s}{b} \right), & 0 \leq s/b < 1/2, \\ \frac{\gamma_{us} + \gamma_{isf}}{2} - \frac{\gamma_{us} - \gamma_{isf}}{2} \cos \frac{2\pi s}{b}, & 1/2 \leq s/b < 1. \end{cases} \quad (9)$$

Здесь  $\gamma_{us}$  и  $\gamma_{isf}$  – максимальное и минимальное значения  $\gamma_{gsf}(s)$ , характеризующие нестабильную и стабильную конфигурации обобщенного дефекта упаковки. В случае Au, согласно [32],  $\gamma_{us} \approx 0.134$  Дж/м<sup>2</sup>, а  $\gamma_{isf} \approx 0.033$  Дж/м<sup>2</sup>. Используя эти значения параметров и формулы (1), (2), (4)–(9), были рассчитаны карты энергии  $\Delta W_n(x, s)$  для разных уровней приложенного напряжения и нанопроволок с размерами  $d = 1$  нм (рис. 7) и  $d = 10$  нм (рис. 8). Карты позволяют проанализировать эволюцию системы в пространстве параметров  $(x, s)$  как для нового, так и для стандартного режима деформации.



**Рис. 7.** Карты изменения энергии  $\Delta W_n(x, s)$  для золотой (Au) нанопроволоки с поперечным размером  $d = 1$  нм под действием приложенного сдвигового напряжения (a)  $\tau = 3$  ГПа, (b) 4 ГПа и (c) 4.8 ГПа. Значения  $\Delta W_n$  приведены в единицах  $Db^3$ . Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.



**Рис. 8.** Карты изменения энергии  $\Delta W_n(x, s)$  для золотой (Au) нанопроволоки с поперечным размером  $d = 10$  нм под действием приложенного сдвигового напряжения (a)  $\tau = 1$  ГПа, (b) 2.2 ГПа и (c) 2.9 ГПа. Значения  $\Delta W_n$  приведены в единицах  $10^2 Db^3$ . Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

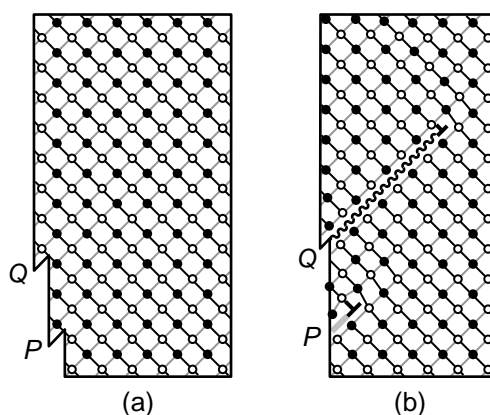
В рамках предложенной модели финальное состояние системы характеризуется парой параметров  $[x = (d - b)\sqrt{2}, s = b]$  и соответствует верхнему правому углу карт энергии на рисунках 7 и 8. Классический режим деформации обозначен пунктирной стрелкой (route 1) в верхней части карт энергии (рис. 7 и 8). Расчеты показывают, что этот режим деформации всегда характеризуется наличием энергетического барьера, обозначенного точкой I на пути 1 (route 1).

Помимо этого, на картах энергии (рис. 7 и 8) можно выделить путь 2 (route 2), соответствующий режиму деформацию через нановозмущения. Путь 2 характеризуется наличием седловой точки II, в которой уровень энергии ниже, чем в точке I. Определение энергии в седловых точках теоретически позволяет в будущем применить результаты модели к родственными термически активируемым механизмам, контролирующим механические свойства нанопроволок. В настоящей работе, однако, температурные эффекты не рассматриваются.

Для определенности рассмотрим приближение нулевой температуры. Для сравнительно низких значений напряжения  $\tau$  (рис. 7a,b и 8a,b) система эволюционирует по пути 3 (route 3) в состояние с минимальной энергией (точка III). На этом пути

энергетические барьеры отсутствуют. Однако это состояние не является финальным  $[x = (d - b)\sqrt{2}, s = b]$ . Т.е. при низких напряжениях при нулевой температуре система никогда не достигает конечной конфигурации. Для высоких же значений напряжения деформация посредством нановозмущений осуществляется безбарьерным путем, и система достигает конечной конфигурации при нулевой температуре в отличие от стандартного механизма (рис. 7с и 8с). В этом случае идеальная нанопроволока из золота с поперечными размерами  $d = 1$  нм и  $d = 10$  нм оказывается нестабильной по отношению к деформации по механизму нановозмущений. Также наши расчеты показали, что карты энергии  $\Delta W_n(x, s)$  имеют сходный вид в широком диапазоне размеров  $d$  от 1 до 300 нм. Т.е. можно утверждать, что нановозмущения играют важную роль в деформировании идеальных металлических ГЦК нанопроволок при высоких напряжениях и нулевой температуре.

**Влияние ступенек на свободной поверхности на генерацию решеточных дислокаций и механизм нановозмущений в ГЦК нанопроволоках.** В реальных металлических нанопроволоках существуют дополнительные факторы, влияющие на конкуренцию между классическим дислокационным скольжением (рис. 3а–е) и деформацией посредством нановозмущений (рис. 3g–i и 3l–n). В частности, ступеньки на свободных поверхностях сильно влияют на зарождение как решеточных дислокаций, так и нановозмущений. Рассмотрим, к примеру, металлическую ГЦК нанопроволоку, изначально имеющую ступеньки на поверхности (рис. 9а).



**Рис. 9.** Зарождение кристаллографической и некристаллографической (нановозмущение) частичных дислокаций в нанопроволоке со ступеньками на свободной поверхности. (а) Начальная конфигурация со ступеньками  $P$  и  $Q$ . (б) Кристаллографическая частичная дислокация зарождается на ступеньке  $P$ , а нановозмущение зарождается на ступеньке  $Q$ . В результате ступенька  $P$  исчезает (при условии, что ее ширина равна модулю вектора Бюргерса дислокации), а ширина ступеньки  $Q$  уменьшается на величину сдвига  $s$ , характеризующую нановозмущение. Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

Пусть ширина каждой ступеньки равна модулю вектора Бюргерса  $b$  частичной решеточной дислокации. Такая геометрия ступенек значительно облегчает генерацию, как решеточных дислокаций, так и нановозмущений по сравнению с идеально гладкой поверхностью. Это связано с тем, что в обоих процессах зарождения (рис. 9б) происходит уменьшение ширины ступенек (имеется выигрыш в энергии). Однако, эффект для стандартных дислокаций отличается от такового для нановозмущений. При зарождении частичной решеточной дислокации ступенька полностью исчезает (рис. 9б). Как следствие, энергия системы уменьшается на энергию свободной поверхности, занимаемой ступенькой с шириной  $b$ , что значительно облегчает генерацию

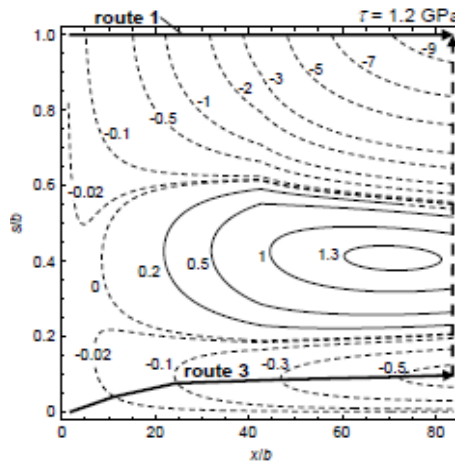
дислокации. В случае же нановозмущения с малой величиной сдвига  $s$  ширина ступеньки уменьшается на эту небольшую величину  $s$  ( $\ll b$ ). Т.е. энергия системы уменьшается на энергию свободной поверхности, занимаемой ступенькой с шириной  $s$ , что незначительно облегчает генерацию нановозмущения. Приведенное рассуждение показывает, что классическая генерация решеточных дислокаций на ступеньках свободной поверхности может доминировать над генерацией нановозмущений на таких же ступеньках (рис. 9b).

Для количественной оценки конкуренции между классическим дислокационным скольжением и механизмом нановозмущений в случае наличия ступенек на поверхности нанопроволоки введем и проанализируем изменение энергии  $\Delta W_n^*$ , характеризующее оба процесса (рис. 9). Для нановозмущения, характеризующегося величиной сдвига  $s$  и зарождающегося на ступеньке  $Q$ , изменение энергии  $\Delta W_n^*$  задается формулой (1), в которой слагаемое  $W_s$  заменяется на  $-W_s$ . То есть

$$\Delta W_n^* = W_d - W_s + W_{gsf} - A, \quad (10)$$

где  $W_d$ ,  $W_s$ ,  $W_{gsf}$  и  $A$  определены в предыдущем пункте. При  $s = b$  формула (10) трансформируется в выражение для изменения энергии, характеризующее классическое зарождение и скольжение частичной решеточной дислокации. Соответственно анализ выражения (10) позволяет одновременно рассчитать энергетические характеристики как нового, так и классического режимов деформации.

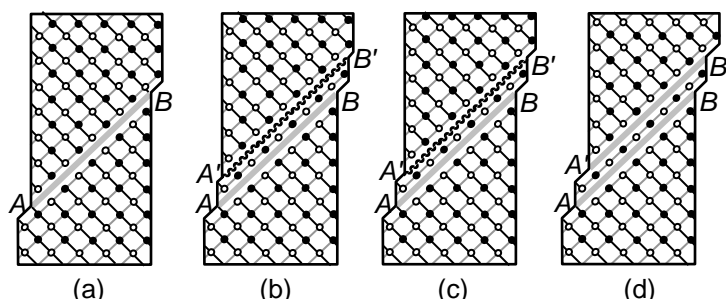
На рисунке 10 показана карта энергии  $\Delta W_n^*(x, s)$ , рассчитанная по формуле (10), для золотой (Au) нанопроволоки с размером  $d = 10$  нм для приложенного напряжения  $\tau = 1.2$  ГПа. В отличие от карт энергии идеальных нанопроволок (рис. 3 и 5) карта энергии  $\Delta W_n^*(x, s)$  имеет безбарьерный путь 1 (соответствующий классическому зарождению и скольжению решеточных частичных дислокаций). А путь 3 (route 3), соответствующий механизму нановозмущений, по-прежнему имеет барьер на пути к финальной конфигурации  $[x = (d - b)\sqrt{2}, s = b]$ . Таким образом, согласно расчетам (рис. 10) классический режим деформации – зарождение и скольжение решеточных дислокаций – оказывается более выгодным, чем деформации посредством нановозмущений в золотых нанопроволоках со ступеньками на поверхности.



**Рис. 10.** Карты изменения энергии  $\Delta W_n^*(x, s)$  для золотой (Au) нанопроволоки с поперечным размером  $d = 10$  нм под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau = 1.2$  ГПа. Значения  $\Delta W_n^*$  приведены в единицах  $10^2 D b^3$ . Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

В общем случае, вероятность наличия ступенек на поверхности нанопроволоки увеличивается с ее размером. Соответственно, логично ожидать, что режим деформации посредством нановозмущений будет доминировать при уменьшении размера нанопроволоки. И наоборот, классический дислокационный механизм доминирует с увеличением размера нанопроволоки.

**Геометрия, энергия и силовые характеристики формирования двойников посредством механизма нановозмущений в ГЦК нанопроволоках.** Выше рассматривалось исключительно зарождение изолированных нановозмущений. В тоже время, представляет интерес зарождение нановозмущения на атомной плоскости, соседствующей с уже существующим дефектом упаковки (рис. 11а–с), который сам может возникать в процессе эволюции другого нановозмущения). Подобная конфигурация дефектов, состоящая из стабильного дефекта упаковки и нановозмущения в соседней плоскости, можно рассматривать как зародыш деформационного двойника. Если быть более точным, то зародыш двойника образуется, когда нановозмущение трансформируется в стабильный дефект упаковки (рис. 11d) и образуется конфигурация из двух дефектов упаковки наномасштабного размера. Подобные конфигурации (часто называемые микродвойниками) теоретически исследовались в работах [6, 32–34], посвященных изучению конкуренции дислокационного скольжения и двойникового в поликристаллах. Согласно [6, 32–34] энергия обобщенного дефекта упаковки, растущего в плоскости, соседствующей со стабильным дефектом упаковки, отличается от таковой у одиночного дефекта. Кроме того, ступенька на свободной поверхности, которая образовалась при формировании изначального дефекта упаковки (или на которой этот дефект зародился), является концентратором напряжений, облегчающим зарождение нановозмущения по соседству. Таким образом, условия зарождения наномасштабного зародыша двойника (рис. 11) отличны от условий формирования изолированного нановозмущения (рис. 3g–i и 3l–n).



**Рис. 11.** Генерация зародыша двойника посредством механизма нановозмущений в нанопроволоке. (а) Нанопроволока в начальном состоянии, содержащая стабильный дефект упаковки АВ. (b) и (с) Нановозмущение  $A'B'$  зарождается и эволюционирует в соседней кристаллографической плоскости. (d) Нановозмущение трансформируется в стабильный дефект упаковки (соседствующий с изначально существующим дефектом упаковки). В результате возникает наномасштабный зародыш двойника, образованный двумя стабильными дефектами упаковки АВ и  $A'B'$ . Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

Рассчитаем изменение энергии  $\Delta W_t$ , характеризующее генерацию зародыша двойника через нановозмущение (рис. 11). Обсуждаемая ситуация отличается от зарождения изолированных нановозмущений в двух следующих аспектах. Во-первых, начальная конфигурация содержит стабильный дефект упаковки (рис. 11а) с энергией  $\gamma_{isf} \sqrt{3}d^2$  (где  $\sqrt{3}d^2$  – площадь плоскости скольжения). Во-вторых, обобщенный дефект упаковки с энергией  $W_{if}$  зарождается и растет в кристаллографической плоскости,

соседствующей со стабильным дефектом упаковки (рис. 11b,c), в отличие от изолированного дефекта упаковки с энергией  $W_{gsf}$  (рис. 3). Соответственно, изменение энергии  $W_{tf}$  может быть записано в следующем виде:

$$\Delta W_t = W_d + W_s + W_{tf} - \gamma_{isf} S - A, \quad (11)$$

где  $W_d$ ,  $W_s$ ,  $S$  и  $A$  задаются формулами (4)–(8). Энергия  $W_{tf}$  обобщенного дефекта упаковки со стабильным дефектом упаковки в соседней плоскости (рис. 11) равна

$$W_{tf} = \gamma_{tf}(s)S, \quad (12)$$

где  $\gamma_{tf}(s)$  – удельная энергия (в расчете на единицу площади) обсуждаемого дефекта упаковки. Используя [32], функцию  $\gamma_{tf}(s)$  можно аппроксимировать следующей формулой:

$$\gamma_{tf}(s/b) = \begin{cases} \gamma_{isf} + \frac{\gamma_{ut} - \gamma_{isf}}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi s}{b}\right), & 0 \leq s/b < 1/2, \\ \frac{\gamma_{ut} + 2\gamma_{tsf}}{2} - \frac{\gamma_{ut} - 2\gamma_{tsf}}{2} \cos \frac{2\pi s}{b}, & 1/2 \leq s/b < 1. \end{cases} \quad (13)$$

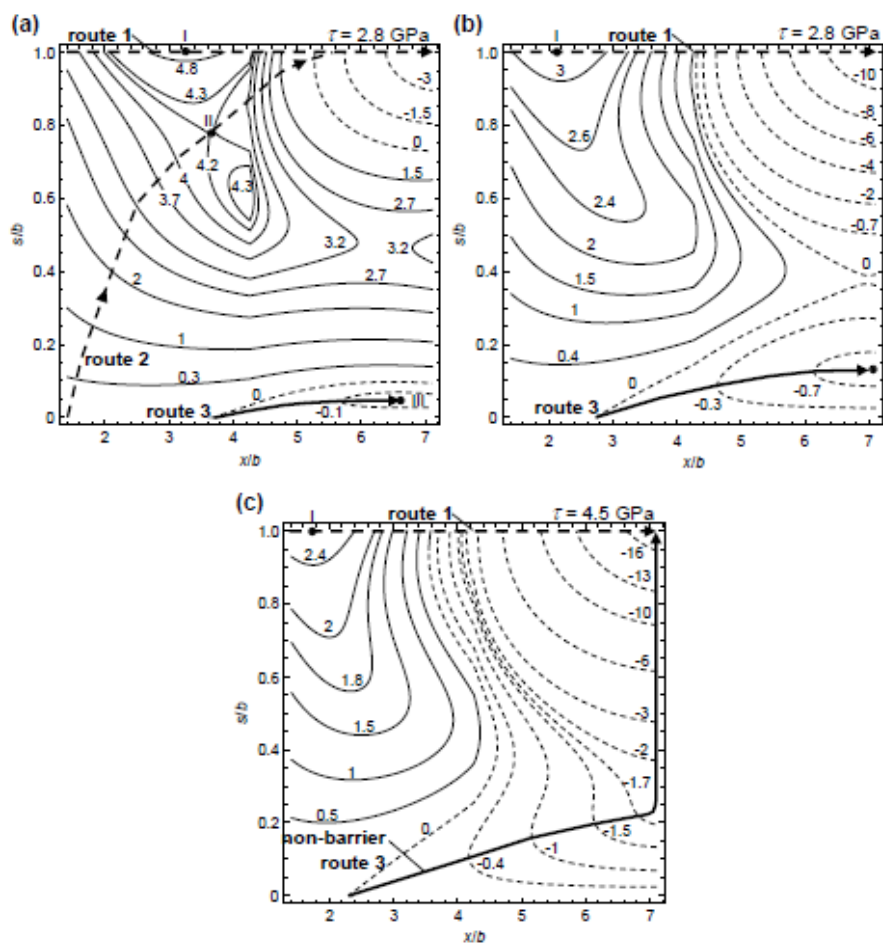
Здесь  $\gamma_{ut}$  – максимальное значение  $\gamma_{tf}(s)$ , соответствующее нестабильной конфигурации обобщенного дефекта упаковки,  $\gamma_{tsf}$  – энергия обобщенного дефекта упаковки в стабильной конфигурации. В золоте (Au)  $\gamma_{ut} = 0.148$  Дж/м<sup>2</sup>,  $2\gamma_{tsf} = 0.031$  Дж/м<sup>2</sup> [32].

Мы рассчитали карты энергии  $\Delta W_t(x, s)$  для разных уровней приложенного напряжения и нанопроволок с размерами  $d = 1$  нм (рис. 12) и  $d = 10$  нм (рис. 13). Карты энергии для зарождения двойников (рис. 12, 13) очень похожи на аналогичные карты для изолированных нановозмущений (рис. 7, 8). Соответственно, все выводы, касающиеся изолированных нановозмущений также применимы к зарождению двойников. Точно также существуют три возможных пути (route 1–3 на рис. 12 и 13) наномасштабной двойниковой деформации. Путь 1 соответствует классическому микромеханизму двойникового путем эмиссии и скольжения кристаллографических частичных дислокаций (рис. 14). Путь 2 соответствует микромеханизму двойникового, связанному с нановозмущениями (рис. 10). Оба пути 1 и 2 характеризуются наличием ненулевых энергетических барьеров (рис. 12a, 13a). В тоже время существует безбарьерный путь 3, также связанный с деформацией путем нановозмущений. Эволюция системы по пути 3 при относительных низких напряжениях (рис. 12b, 13b) останавливается в состоянии  $[x = (d - b)\sqrt{2}, s \approx 0.1b]$ , не достигая финального состояния  $[x = (d - b)\sqrt{2}, s = b]$ , в котором формируется двухслойный двойник (рис. 11d). Система, эволюционирующая по пути 3, достигает финального состояния  $[x = (d - b)\sqrt{2}, s = b]$  только при высоких уровнях приложенного напряжения (рис. 12c, 13c).

Помимо этого, из рисунков 7, 8, 12, 13 вытекает, что двойникование (рис. 11) энергетически предпочтительнее формирования изолированных нановозмущений (рис. 3) и стабильных дефектов упаковки (рис. 5). Для иллюстрации этого факта мы рассчитали зависимости критического напряжения  $\tau_c$  (минимального напряжения, при котором деформация осуществляется безбарьерным путем) от размера нанопроволоки  $d$



для Au и Cu для случая наномасштабного зарождения двойников и изолированных дефектов упаковки через нановозмущения (рис. 15).



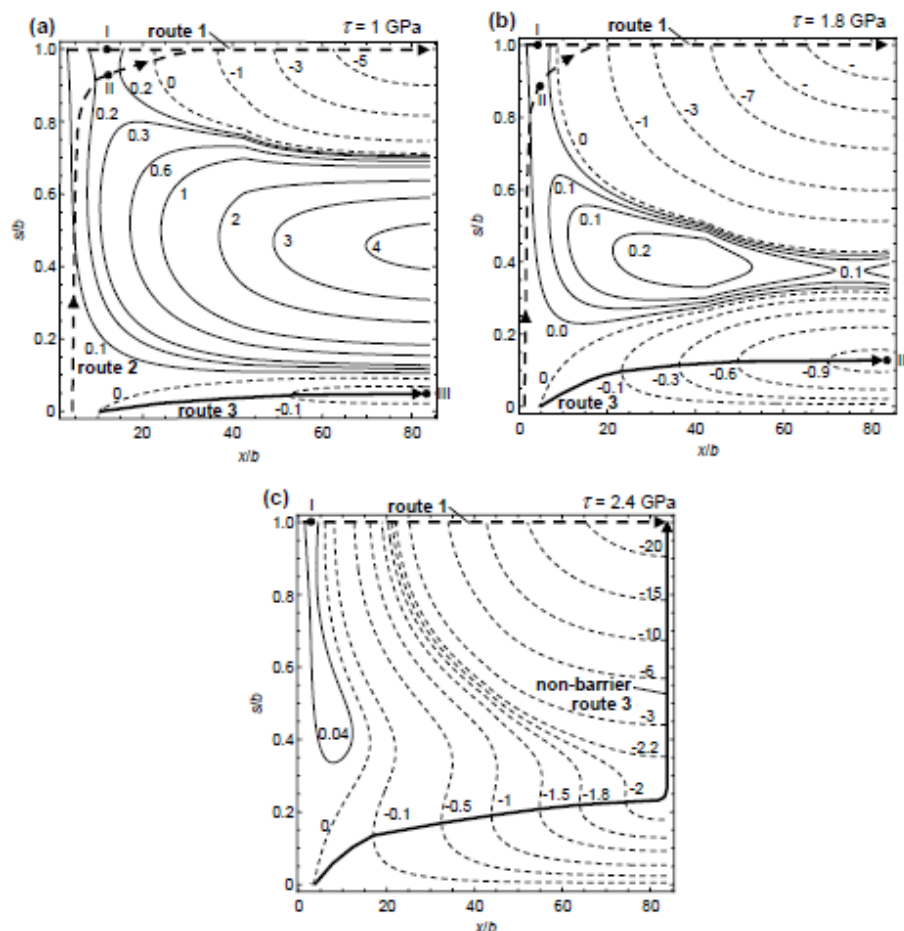
**Рис. 12.** Карты изменения энергии  $\Delta W_i(x, s)$  для золотой (Au) нанопроволоки с поперечным размером  $d = 1$  нм под действием приложенного сдвигового напряжения (a)  $\tau = 2.8$  ГПа, (b) 3.8 ГПа и (c) 4.5 ГПа. Значения  $\Delta W_i$  приведены в единицах  $Db^3$ . Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

Для Cu использовались следующие типичные значения параметров:  $G = 48$  ГПа,  $\nu = 0.34$ ,  $\gamma_s = 1.725$  Дж/м<sup>2</sup> [30],  $\gamma_{us} = 0.18$  Дж/м<sup>2</sup>,  $\gamma_{isf} = 0.041$  Дж/м<sup>2</sup>,  $\gamma_{ut} = 0.2$  Дж/м<sup>2</sup>,  $2\gamma_{isf} = 0.04$  Дж/м<sup>2</sup> [32]. Рассчитанные зависимости показывают, что критическое напряжение  $\tau_c$ , характеризующее зарождение двойников ниже (приблизительно на 15 %) по сравнению с таковым для изолированных дефектов упаковки в Au (рис. 15a) и Cu (рис. 15b). Аналогичный результат должен быть справедлив для любого ГЦК металла, энергии  $\gamma_{isf}$ ,  $\gamma_{us}$  и  $\gamma_{ut}$  которого удовлетворяют неравенству  $\gamma_{ut} - \gamma_{isf} < \gamma_{us}$ .

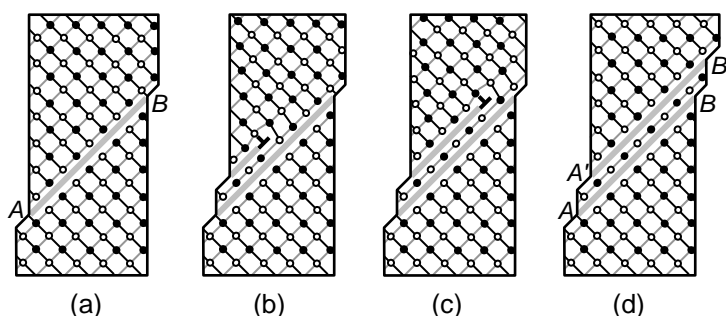
Зависимости на рис. 15 демонстрируют типичный размерный эффект (чем меньше – тем прочнее) в диапазоне размеров от  $d$  от 1 до 300 нм. Также следует заметить, что критические напряжения в золотых и медных нанопроволоках для  $d = 10$  нм и ниже очень велики. Для Au при  $d = 10$  нм  $\tau_c \approx 0.1G$  для изолированных нановозмущений и  $\tau_c \approx 0.09G$  для наномасштабных деформационных двойников (рис. 15a). Для Cu те же величины равны  $0.09G$  и  $0.08G$  соответственно (рис. 15b). В случае меди значения сдвигового напряжения  $\tau_c$  попадают в диапазон от  $0.02G$  до  $0.09G$ , измеренный в



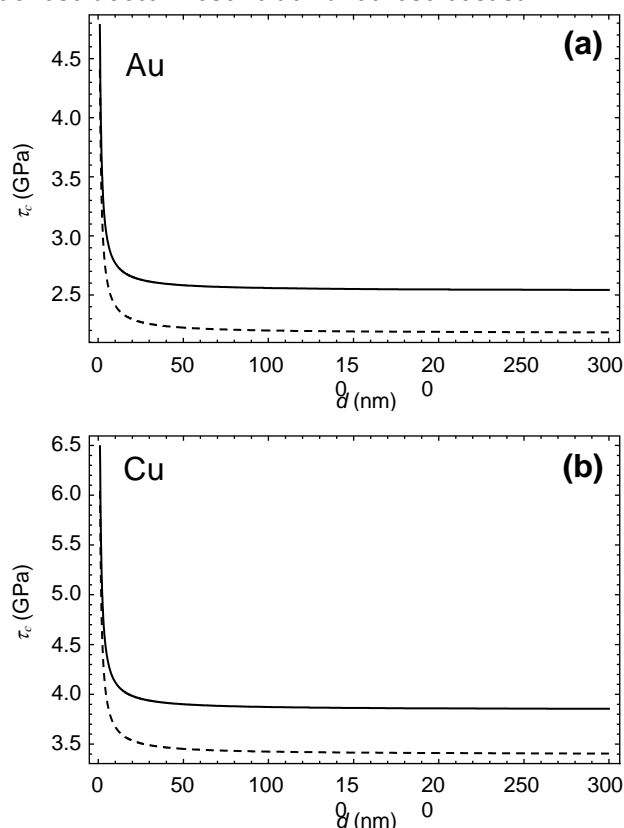
эксперименте [19] по растяжению при комнатной температуре медных нанопроволок с размерами сечения от 75 до 280 нм.



**Рис. 13.** Карты изменения энергии  $\Delta W_i(x, s)$  для золотой (Au) нанопроволоки с поперечным размером  $d = 10$  нм под действием приложенного сдвигового напряжения (a)  $\tau = 1$  ГПа, (b) 1.8 ГПа и (c) 2.4 ГПа. Значения  $\Delta W_i$  приведены в единицах  $10^2 Db^3$ . Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.



**Рис. 14.** Генерация зародыша двойника посредством дислокационного механизма в нанопроволоке. (a) Нанопроволока в начальном состоянии, содержащая стабильный дефект упаковки AB. (b) и (c) Частичная дислокация скользит по кристаллографической плоскости, соседствующей с дефектом упаковки. (d) Скольжение дислокации заканчивается на свободной поверхности, что приводит к формированию наномасштабного зародыша двойника, состоящего из двух стабильных дефектов упаковки AB и A'B'. Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.



**Рис. 15.** Зависимости критического напряжения  $\tau_c$  (минимального напряжения, при котором деформация осуществляется безбарьерным путем) от размера  $d$  в (а) золотых (б) медных нанопроволоках. Сплошные кривые соответствуют образованию изолированных нановозмущений, пунктирные кривые соответствуют формированию наномасштабных зародышей двойников. Воспроизведено из [22] с разрешения American Physical Society.

**Результаты.** Таким образом, новый физический механизм пластического течения – деформационный режим, связанный с образованием и эволюцией приповерхностных нановозмущений (рис. 3g–i, 3l–n) – может действовать в деформируемых нанопроволоках с ГЦК структурой благодаря наномасштабным и поверхностным эффектам. Также было установлено, что зарождение и рост наномасштабных деформационных двойников может быть реализован в результате последовательного формирования и эволюции нановозмущений в соседних кристаллографических плоскостях (рис. 11). Результаты расчетов энергетических характеристик (рис. 7, 8) показывают, что режим деформации через нановозмущения доминирует над стандартным механизмом зарождения и скольжения дислокаций в идеальных Au нанопроволоках в приближении нулевой температуры. В тоже время в неидеальных нанопроволоках со ступеньками на свободной поверхности (рис. 9) классический режим деформации наоборот энергетически предпочтительнее режима нановозмущений.

Также мы теоретически исследовали роль нановозмущений в генерации наномасштабных деформационных двойников в деформируемых ГЦК нанопроволоках. Было показано, что под действием высоких механических напряжений в нанопроволоках возможно безбарьерное образование таких двойников посредством генерации нановозмущений (рис. 11). Расчеты показали (рис. 7, 8, 12, 13), что образование наномасштабных двойников (рис. 11) энергетически предпочтительнее формирования изолированных нановозмущений (рис. 3) и стабильных дефектов

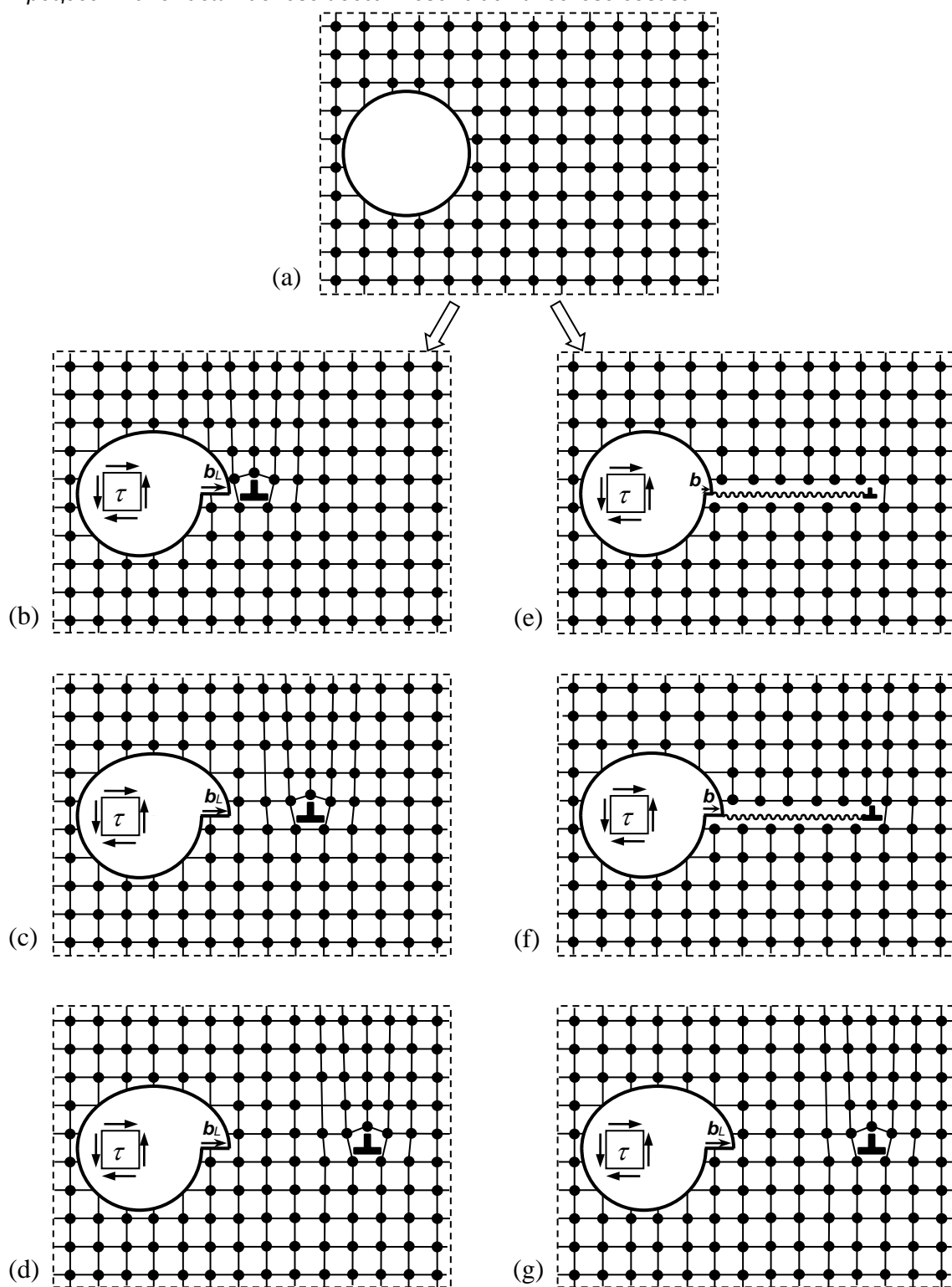
упаковки (рис. 5). Критическое напряжение  $\tau_c$  (минимального напряжения, при котором деформация осуществляется безбарьерным путем), характеризующее зарождение двойников ниже (приблизительно на 15 %) по сравнению с таковым для изолированных дефектов упаковки в Au и Cu нанопроволоках (рис. 15). Критическое напряжение  $\tau_c$  чувствительно к поперечному размеру нанопроволоки  $d$ . В диапазоне размеров от  $d$  от 1 до 300 нм зависимости  $\tau_c(d)$  демонстрируют типичный размерный эффект (чем меньше – тем прочнее) (рис. 15). Для ультратонких нанопроволок значения  $\tau_c$  исключительно велики: при  $d = 10$  нм  $\tau_c \approx 0.1 G$  в Au (рис. 15a) и  $\approx 0.08 G$  в Cu (рис. 15b).

Предложенная теория пластической деформации посредством нановозмущений в нанопроволоках косвенно поддерживается следующими экспериментами и компьютерными моделями: (i) экспериментами [23, 24] по пластической деформации золотых (Au) нанопроволок, (ii) экспериментами [25] по деформации Гам-металлов, (iii) результатами моделирования [27] пластического течения методами молекулярной динамики в одиночных нанокристаллах сфероидальной формы.

### 3. Испускание дислокаций порами в нанокристаллических материалах в результате наномасштабного пластического сдвига

Пластичность, являющаяся чрезвычайно важной характеристикой нанокристаллических материалов (НКМ), существенным образом зависит от поведения пор в таких материалах при механической нагрузке. Растягивающие напряжения в кристаллах стимулируют рост пор, скорость которого обычно контролируется диффузионным массопереносом особенно в случае высоких температур [35]. Вообще говоря, возможен рост пор и за счет испускания ими дислокаций [36]. Однако, согласно расчетам [36, 37], обычный механизм испускания дислокаций порами (посредством зарождения дислокаций на свободной поверхности поры и ее последующего скольжения в кристалле; см. рис. 16a–d) для многих материалов при квазистатическом нагружении требует преодоления значительного энергетического барьера. Поэтому действие такого механизма является эффективным только в кристаллах при высокоскоростном (ударном) нагружении, при котором действуют предельно высокие касательные напряжения [36]. Новый механизм зарождения дислокаций в НКМ, Гам-металлах (Gum Metal) и нанокомпозитах, основывающийся на представлениях о наномасштабном идеальном сдвиге, реализующемся при высоких касательных напряжениях [1, 26, 38] применим также при описании процесса испускания дислокаций порами в деформируемых твердых телах. В настоящем параграфе дается теоретическое описание нового механизма испускания решеточных и зернограницных дислокаций порами в НКМ, а именно испускания посредством наномасштабного идеального пластического сдвига.

**Испускание дислокаций порами посредством наномасштабного идеального сдвига. Модель.** Действие стандартного и нового механизмов испускания дислокаций порами иллюстрируется на рис. 16. Рассмотрим пору в деформируемом НКМ (рис. 16a). Серия рис. 16b–d демонстрирует стандартный механизм эмиссии решеточной дислокации из поры под действием внешнего касательного напряжения  $\tau$ . Стандартный механизм реализуется посредством зарождения дислокаций на свободной поверхности поры и ее последующего скольжения в кристалле (рис. 16a–d). Расчеты, проведенные в работах [36, 37] показали, что в общем случае энергетический барьер, препятствующий осуществлению подобного процесса достаточно велик. Поэтому стандартный механизм (рис. 16a–d) не является эффективным в кристаллах при квазистатическом нагружении.



**Рис. 16.** Два механизма эмиссии решеточной дислокации из поры. (a) Исходное состояние твердого тела с порой. (b)–(d) Стандартный механизм. (e)–(g) Альтернативный механизм (подробно, см. текст).

Альтернативный (новый) механизм, предлагаемый в настоящей работе, осуществляется посредством наномасштабного идеального сдвига, который обуславливает зарождение частичной дислокации с маленьким «некристаллографическим» вектором Бюргерса и последующее возрастание его модуля до величины  $b_L$  вектора Бюргерса решеточной дислокации или величины  $b_{GB}$

зернограничной дислокации. При этом дислокация с самого начала ее зарождения находится на конечном расстоянии (в первом приближении, от 1 до 50 нанометров) от поры. Рассмотрим действие данного механизма подробно в случае зарождения решеточной дислокации (рис. 16а,е–g). В начальный момент времени под действием приложенного внешнего напряжения в ближайшей окрестности поры (в области концентрации напряжений) происходит идеальный наноскопический сдвиг кристаллической решетки (рис. 16е). Величина  $b$  этого сдвига предполагается малой. Область, в которой осуществляется сдвиг (показана волнистой линией на рис. 16е,ф) представляет собой обобщенный дефект упаковки. В данном случае обобщенный дефект упаковки ограничен с одной стороны порой, а с другой дислокацией с некристаллографическим вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , который изначально характеризуется очень малой величиной (модулем, много меньшим модуля  $b_L$  вектора Бюргерса решеточной дислокации). На следующем этапе модуль  $b$  вектора Бюргерса непрерывно возрастает до величины модуля  $b_L$  вектора Бюргерса решеточной дислокации. В этот момент дефект упаковки, который эволюционирует вместе с возрастанием вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$ , исчезает; на его месте восстанавливается идеальная кристаллическая структура. В финале реализуется конфигурация (рис. 16g), полностью идентичная таковой в случае стандартного механизма испускания дислокации (рис. 16d).

Обсуждаемый процесс испускания дислокации из поры эффективно описывается в рамках дислокационной теории как непрерывное нарастание модуля вектора Бюргерса дислокации, зарождающейся на некотором расстоянии от поры, от 0 до величины  $b_L$  модуля вектора Бюргерса решеточной дислокации. В случае, когда исходная пора сама характеризуется некоторым вектором Бюргерса  $\mathbf{V}$  (см., например, [37]), можно говорить о своеобразном постепенном «перетекании» вектора Бюргерса из поры в испущенную дислокацию. Сама дислокация при этом остается неподвижной. Нарастание вектора Бюргерса дислокации сопровождается изменением энергии обобщенного дефекта упаковки, формирующегося между порой и дислокацией, по некоторому закону, который описывается ниже.

Наряду с испусканием решеточных дислокаций, возможно испускание порами зернограничных дислокаций посредством наномасштабного идеального сдвига. В этом случае зарождение частичной дислокации с «маленьким некристаллографическим» вектором Бюргерса происходит в границе зерна, а его модуль непрерывно возрастает до величины  $b_{GB}$  модуля вектора Бюргерса совершенной зернограничной дислокации, где  $b_{GB}$  задается трансляционной симметрией границы зерна [39]. В целом процесс эмиссии зернограничных дислокаций протекает аналогично эмиссии решеточных дислокаций. Вместе с тем, структура зернограничной фазы изначально менее упорядочена, чем структура тела зерна, а также характеризуется меньшей атомной плотностью. Поэтому, следует ожидать, что обобщенный дефект упаковки, который связан с наномасштабным идеальным сдвигом в границе зерна, характеризуется значительно меньшей энергией по сравнению с обобщенным дефектом упаковки в кристаллической решетке. При этом эмиссия зернограничных дислокаций будет осуществляться значительно легче эмиссии решеточных дислокаций. Поскольку с движением зернограничных дислокаций традиционно связывают процесс зернограничного скольжения [39], описываемый процесс потенциально может давать значительный вклад в пластическую деформацию в НКМ, в которых зернограничное скольжение играет значимую роль.

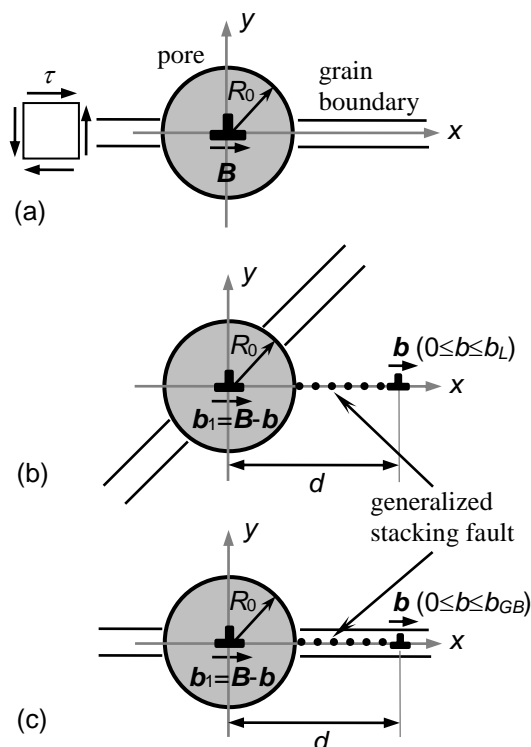
**Энергетические характеристики испускания дислокаций порами посредством наномасштабного идеального сдвига.** Следуя подходу [37], исследуем энергетические характеристики процесса эмиссии решеточных и зернограничных дислокаций из поры посредством наномасштабного идеального сдвига. Модель

процесса схематически представлена на рис. 17. В рамках модели пора имеет цилиндрическую форму, характеризуется вектором Бюргерса  $\mathbf{B}$  и может испускать решеточные или зернограницные дислокации под действием внешнего касательного напряжения  $\tau$ . Подобные поры, характеризующиеся ненулевым дислокационным зарядом, образуются в результате поглощения порами дислокаций или слияния дислокаций [37, 40, 41]. Как следствие, кристаллическая решетка в окрестности поры оказывается искаженной, а сама пора является источником напряжений, подобным дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{B}$ , равным сумме векторов Бюргерса дислокаций, в результате слияния которых возникла пора. Очевидно, что испускание дислокаций из пор с ненулевым значением вектора Бюргерса  $\mathbf{B}$ , должно осуществляться значительно легче по сравнению со случаем  $\mathbf{B} = 0$  из-за дополнительных напряжений, создаваемых порой.

Рис. 17b и 17c иллюстрируют процессы испускания решеточной и зернограницной дислокаций, соответственно. Пунктирной линией изображен обобщенный дефект упаковки длиной  $d - R_0$ . Используем для расчета формулу для изменения энергии  $\Delta W'$  системы в результате зарождения дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  на расстоянии  $d$  от поры, найденную в [37]:

$$\Delta W' = \frac{Db^2}{2} \left\{ \ln \frac{R_0}{r_0} + \ln(\tilde{d}^2 - 1) \right\} + \frac{Db^2}{2} \left\{ 1 - \frac{B}{b} \left( 2 \ln \tilde{d} + \frac{1}{\tilde{d}^2} \right) \right\} - \frac{Db^2}{2} \left\{ \frac{2\pi R_0}{Db} \left( \tilde{d} - \frac{2}{\tilde{d}} + \frac{1}{\tilde{d}^3} \right) \right\}. \quad (14)$$

Здесь  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ ,  $G$  – модуль сдвига,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $R_0$  – радиус поры,  $r_0$  – радиус обрезания дислокации  $b$ ,  $\tilde{d} = d/R_0$ .



**Рис. 17.** Эмиссия решеточных и зернограницных дислокаций из цилиндрических пор. (a) Исходная пора, характеризуемая вектором Бюргерса  $\mathbf{B}$ . (b) Испускание решеточной дислокации путем наномасштабного идеального сдвига с образованием обобщенного дефекта упаковки (пунктирная линия). (c) Испускание зернограницной дислокации путем наномасштабного идеального сдвига с образованием обобщенного дефекта упаковки (пунктирная линия).

В нашем случае к выражению (14) необходимо добавить энергию обобщенного дефекта упаковки, формирующегося между порой и дислокацией. Для случая испускания зернограницной дислокации мы воспользуемся выражением, использовавшимся ранее в работе [26]:

$$W_{\gamma}^{GB} = \lambda \gamma_{isf} (d - R_0) \sin \frac{\pi b}{b_{GB}}, \quad (15)$$

где  $\lambda$  – некоторая постоянная меньшая единицы,  $\gamma_{isf}$  – удельная энергия обычного (стабильного) дефекта упаковки (в расчете на единицу площади),  $b_{GB}$  – вектор Бюргерса зернограницной дислокации. Синусоидальный характер зависимости (15) приводит к тому, что при  $b = b_{GB}/2$  энергия обобщенного дефекта упаковки достигает максимума  $W_{\gamma}^{GB} = \lambda \gamma_{isf} d$ , а при  $b = b_{GB}$  энергия  $W_{\gamma}^{GB} = 0$ . Коэффициент  $\lambda$  с физической точки зрения означает степень различия энергии обобщенного дефекта упаковки в границе и теле зерна. Первая энергия значительно меньше второй (см. обсуждение выше), что описывается условием  $\lambda < 1$ .

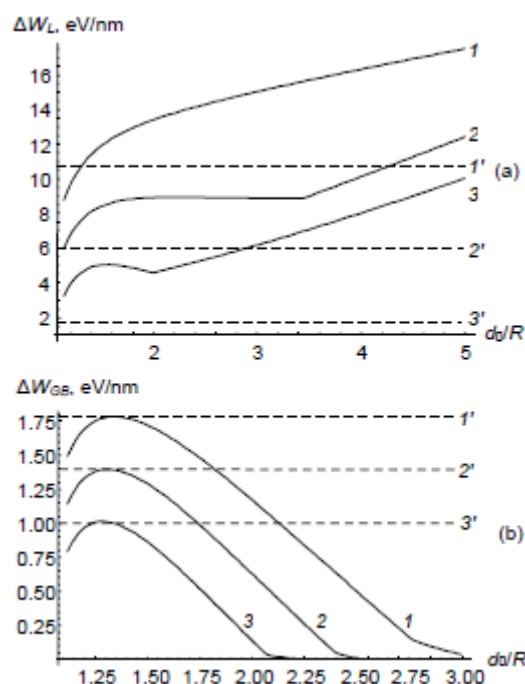
Для случая испускания решеточной дислокации мы воспользуемся специфической «двугорбой» зависимостью энергии обобщенного дефекта упаковки от вектора Бюргерса  $b$ , общий вид которой был предложен Wu и др. [42] для нанокристаллического Ni:

$$W_{\gamma}^L = \gamma'(b)(d - R_0), \text{ где } \gamma'(b) = \begin{cases} \gamma_{us} \sin \frac{2\pi b}{b_L}, & \text{при } b < \frac{b_L}{4}, \\ \frac{\gamma_{us} + \gamma_{isf}}{2} - \frac{\gamma_{us} - \gamma_{isf}}{2} \cos \frac{4\pi b}{b_L}, & \text{при } \frac{b_L}{4} \leq b < \frac{3b_L}{4}, \\ -\gamma_{us} \sin \frac{2\pi b}{b_L}, & \text{при } \frac{3b_L}{4} \leq b \leq b_L. \end{cases} \quad (16)$$

Здесь  $b_L$  – вектор Бюргерса решеточной дислокации, а  $\gamma_{us}$  максимальное значение удельной энергии обобщенного дефекта упаковки, соответствующее нестабильной конфигурации дефекта. Таким образом, полное изменение энергии системы в результате формирования обобщенного дефекта упаковки и дислокации вблизи поры задается выражением  $\Delta W_L = \Delta W' + W_{\gamma}^L$  для случая испускания решеточной дислокации и  $\Delta W_{GB} = \Delta W' + W_{\gamma}^{GB}$  для случая испускания зернограницной дислокации.

**Энергетический барьер и критическое расстояние между порой и дислокацией.** Рассчитаем зависимость высоты энергетического барьера, препятствующего испусканию дислокаций из пор от длины  $d_0$  области наномасштабного идеального сдвига (обобщенного дефекта упаковки) на примере Ni и Cu. Для этих материалов характерны следующие значения параметров [28, 43]: Ni – параметр решетки  $a = 3.52 \text{ \AA}$ ,  $G = 73 \text{ ГПа}$ ,  $\nu = 0.34$ ,  $\gamma_{isf} = 0.183 \text{ Дж/м}^2$ ; Cu –  $a = 3.61 \text{ \AA}$ ,  $G = 48 \text{ ГПа}$ ,  $\nu = 0.34$ ,  $\gamma_{isf} = 0.045 \text{ Дж/м}^2$ . Типичный решеточный вектор Бюргерса для этих металлов равен  $b_L = a/\sqrt{2}$ , зернограницный вектор Бюргерса будем полагать равным  $b_{GB} = 1 \text{ \AA}$ , радиус обреза, фигурирующий в (14),  $r_0 = b$ . Постоянные  $\lambda \approx 0.1$  [26],  $\gamma_{us} = 1.25\gamma_{isf}$ . На рис. 18, 19 приведены результаты расчетов испускания из поры радиусом  $R_0 = 10b_L$  зернограницных (рис. 18а, 19а) и решеточных (рис. 18б, 19б) дислокаций для разных значений вектора Бюргерса  $B$  поры для, соответственно, Ni и

Си. Пунктирными линиями показаны высоты энергетических барьеров для случая традиционного испускания (рассчитываемые по формуле (14); см. [37]). Видно, что при определенных условиях высота барьера может падать до нуля, т.е. в принципе возможен переход к безбарьерному испусканию дислокаций. Очевидно также, что испускание зернограничных дислокаций при прочих равных условиях осуществляется значительно легче по сравнению с решеточными, что особенно хорошо видно на примере Ni (рис. 18а), в котором по причине высокой энергии дефекта упаковки высота барьера, препятствующего испусканию решеточных дислокаций, начиная с определенного момента, растет с возрастанием длины обобщенного дефекта упаковки.

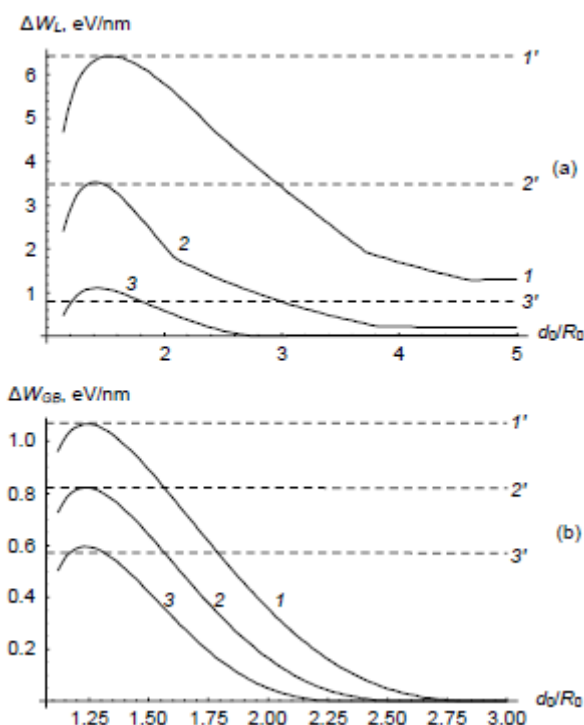


**Рис. 18.** Зависимость высоты энергетического барьера, препятствующего эмиссии дислокаций, от длины обобщенного дефекта упаковки  $d_0$  (отнесенного к радиусу поры  $R_0$ ) в Ni. (а) Эмиссия решеточных дислокаций; кривые 1, 2 и 3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B=0$ ,  $b_L$ ,  $2b_L$ , соответственно. (б) Эмиссия зернограничных дислокаций; кривые 1, 2 и 3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B=0$ ,  $0.25b_L$ ,  $0.5b_L$ , соответственно. Пунктирные линии 1', 2' и 3' показывают высоту энергетического барьера для случаев обычного испускания дислокаций за счет скольжения. Величина внешнего напряжения полагалась равной  $\tau = 1$  ГПа, радиус поры  $R_0 = 10b_L$ .

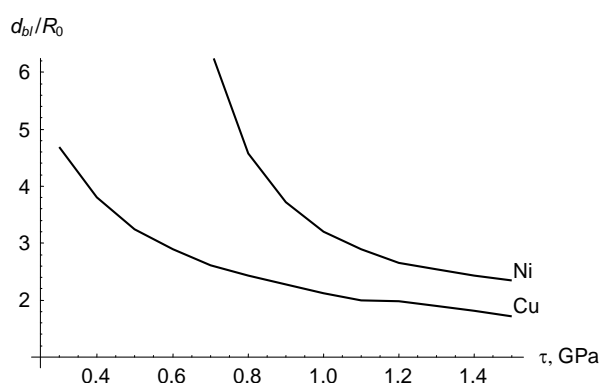
Зависимость критической длины  $d_{bl}$ , при которой происходит переход к безбарьерной эмиссии от величины внешнего напряжения, приведена на рис. 20 для случая зернограничных дислокаций и пор без дислокационного заряда ( $B = 0$ ). Результат вполне ожидаемый – чем выше внешнее напряжение, тем короче критическая длина  $d_{bl}$  области наномасштабного идеального сдвига, и, как следствие, облегчается испускание дислокаций. Переход к безбарьерному испусканию в случае решеточных дислокаций при  $B = 0$  оказывается практически невозможным для Ni из-за высокой энергии дефекта упаковки. Для Ni безбарьерное испускание становится возможным при напряжениях выше  $\tau_c = 5.6$  ГПа – недостижимая на практике величина. Для Cu критическое напряжение такого же перехода составляет  $\tau_c = 1.4$  ГПа, что также весьма



значительная цифра. Для зернограницных дислокаций переход к безбарьерному испусканию теоретически возможен вплоть до достаточно малых напряжений.



**Рис. 19.** Зависимость высоты энергетического барьера, препятствующего эмиссии дислокаций, от длины обобщенного дефекта упаковки  $d_0$  (отнесенного к радиусу поры  $R_0$ ) в Cu. (a) Эмиссия решеточных дислокаций; кривые 1, 2 и 3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B=0, b_L, 2b_L$ , соответственно. (b) Эмиссия зернограницных дислокаций; кривые 1, 2 и 3 соответствуют величинам вектора Бюргерса поры  $B=0, 0.25b_L, 0.5b_L$ , соответственно. Пунктирные линии 1', 2' и 3' показывают высоту энергетического барьера для случаев обычного испускания дислокаций за счет скольжения. Величина внешнего напряжения полагалась равной  $\tau = 1$  ГПа, радиус поры  $R_0 = 10b_L$ .



**Рис. 20.** Зависимость критической длины обобщенного дефекта упаковки  $d_{bl}$ , при которой осуществляется переход к безбарьерному испусканию, от величины внешнего напряжения для эмиссии зернограницных дислокаций в Ni и Cu ( $\tau = 1$  ГПа, радиус поры  $R_0 = 10b_L, B=0$ ).

**Результаты.** Таким образом, испускание решеточных и зернограницных дислокаций порами в НКМ при механическом нагружении возможно путем наномасштабного идеального сдвига при реалистичных значениях приложенного

напряжения. При этом дислокация зарождается на конечном расстоянии от поры, а модуль ее вектора Бюргерса непрерывно увеличивается от нуля до модуля вектора Бюргерса решеточной или зернограничной дислокации. Испускание дислокации путем наномасштабного идеального сдвига в нанокристаллических Ni и Cu является энергетически выгодным и безбарьерным процессом при достаточно высоких значениях внешнего напряжения. Испускание зернограничных дислокаций при прочих равных условиях осуществляется значительно легче по сравнению с решеточными дислокациями. Это обуславливает значительное влияние исследуемого процесса в условиях, когда зернограничное скольжение вносит существенный вклад в пластическую деформацию.

#### 4. Результаты и выводы

Таким образом, в настоящей работе описаны теоретические модели, базирующиеся на концепции наномасштабного идеального сдвига (нановозмущения), представляющего собой альтернативу стандартному механизму зарождению решеточных дислокаций. Предложена модель нового физического механизма пластического течения в нанопроволоках, связанного с образованием и эволюцией приповерхностных нановозмущений (рис. 3g–i, 3l–n). Выяснено, что этот механизм способен (по энергетическим соображениям) действовать в деформируемых нанопроволоках с ГЦК структурой благодаря наномасштабным и поверхностным эффектам. Результаты расчетов энергетических характеристик (рис. 7, 8) показывают, что режим деформации через нановозмущения доминирует над стандартным механизмом зарождения и скольжения дислокаций в идеальных Au нанопроволоках в приближении нулевой температуры. В тоже время в неидеальных нанопроволоках со ступеньками на свободной поверхности (рис. 9) классический режим деформации наоборот энергетически предпочтительнее режима нановозмущений.

Также теоретически исследована роль нановозмущений в генерации наномасштабных деформационных двойников в деформируемых ГЦК нанопроволоках. Было показано, что под действием высоких механических напряжений в нанопроволоках возможно безбарьерное образование таких двойников посредством генерации нановозмущений (рис. 11). Расчеты показали (рис. 7, 8, 12, 13), что образование наномасштабных двойников (рис. 11) энергетически предпочтительнее формирования изолированных нановозмущений (рис. 3) и стабильных дефектов упаковки (рис. 5). Критическое напряжение  $\tau_c$  (минимальное напряжение, при котором деформация осуществляется безбарьерным путем), характеризующее зарождение двойников ниже (приблизительно на 15%) по сравнению с таковым для изолированных дефектов упаковки в Au и Cu нанопроволоках (рис. 15). Критическое напряжение  $\tau_c$  чувствительно к поперечному размеру нанопроволоки  $d$ . В диапазоне размеров от  $d$  от 1 до 300 нм зависимости  $\tau_c(d)$  демонстрируют типичный размерный эффект (чем меньше – тем прочнее) (рис. 15). Для ультратонких нанопроволок значения  $\tau_c$  исключительно велики: при  $d = 10$  нм  $\tau_c \approx 0.1G$  в Au (рис. 15a) и  $\approx 0.08G$  в Cu (рис. 15b).

Предложена модель испускания решеточных и зернограничных дислокаций порами в нанокристаллических материалах путем наномасштабного идеального сдвига при реалистичных значениях приложенного напряжения. При этом дислокация зарождается на конечном расстоянии от поры, а модуль ее вектора Бюргерса непрерывно увеличивается от нуля до модуля вектора Бюргерса решеточной или зернограничной дислокации. Испускание дислокации путем наномасштабного идеального сдвига в нанокристаллических Ni и Cu является энергетически выгодным и

безбарьерным процессом при достаточно высоких значениях внешнего напряжения. Испускание зернограницных дислокаций при прочих равных условиях осуществляется значительно легче по сравнению с решеточными дислокациями. Это обуславливает значительное влияние исследуемого процесса в условиях, когда зернограницное скольжение вносит существенный вклад в пластическую деформацию.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-29-00199).*

## Литература

- [1] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **54** (2006) 2489.
- [2] T. Saito, T. Furuto, J.-H. Hwang, S. Kuramoto, K. Nishino, N. Suzuki, R. Chen, A. Yamada, K. Ito, Y. Seno, T. Nonaka, H. Ikehata, N. Nagasako, C. Iwamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma // *Science* **300** (2003) 464.
- [3] T. Saito, T. Furuto, J.-H. Hwang, S. Kuramoto, K. Nishino, N. Suzuki, R. Chen, A. Yamada, K. Ito, Y. Seno, T. Nonaka, H. Ikehata, N. Nagasako, C. Iwamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma // *Materials Science Forum* **426–432** (2003) 681.
- [4] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **56** (2008) 1642.
- [5] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov, E. Kaxiras // *Physical Review B* **62** (2000) 3099.
- [6] N. Bernstein, E.B. Tadmor // *Physical Review B* **69** (2004) 094116.
- [7] Р. Хоникомб, *Пластическая деформация металлов* (Мир, М., 1972).
- [8] M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, J.N. Florando, W.D. Nix // *Science* **305** (2004) 986.
- [9] J.R. Greer, W.D. Nix // *Physical Review B* **73** (2006) 245410.
- [10] J.R. Greer // *Reviews on Advanced Materials Science* **13** (2006) 59.
- [11] S. Brinckmann, J.-Y. Kim, J. R. Greer // *Physical Review Letters* **100** (2008) 155502.
- [12] A.T. Jennings, M.J. Burek, J. R. Greer // *Physical Review Letters* **104** (2010) 135503.
- [13] Z.W. Shan, R. Mishra, S.A. Syed Asif, O.L. Warren, A.M. Minor // *Nature Materials* **7** (2007) 115.
- [14] H. Bei, S. Shim, E.P. George, M.K. Miller, E.G. Herbert, G.M. Pharr // *Scripta Materialia* **57** (2007) 397.
- [15] A. Cao, Y. Wei // *Physical Review B* **74** (2006) 214108.
- [16] H.S. Park, K. Gall, J.A. Zimmerman // *Physical Review Letters* **95** (2005) 255504.
- [17] E. Rabkin, D.J. Srolovitz // *Nano Letters* **7** (2007) 101.
- [18] T. Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall // *Physical Review Letters* **100** (2008) 025502.
- [19] H. Tang, K.W. Schwarz, H.D. Espinosa // *Physical Review Letters* **100** (2008) 185503.
- [20] G. Richter, K. Hillerich, D.S. Gianola, R. Mönig, O. Kraft, C.A. Volkert // *Nano Letters* **9** (2009) 3048.
- [21] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **103** (2009) 135501.
- [22] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B* **83** (2011) 054111.
- [23] Y. Kurui, Y. Oshima, M. Okamoto, K. Takayanagi // *Physical Review B* **79** (2009) 165414.
- [24] M.J. Lagos, F. Sato, D.S. Galvão, D. Ugarte // *Physical Review Letters* **106** (2011) 055501.
- [25] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.J. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang // *Physical Review Letters* **102** (2009) 045503.
- [26] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 211901.
- [27] L. Sun, A.V. Krashennnikov, T. Ahlgren, K. Nordlund, F. Banhart // *Physical Review Letters* **101** (2008) 156101.
- [28] Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Атомиздат, М., 1974).
- [29] I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **88** (2002) 046103.
- [30] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Physical Review B* **66** (2002) 245309.

- [31] F. Glas // *Physical Review B* **74** (2006) 121302(R).
- [32] S. Kibey, J.B. Liu, D.D. Johnson, H. Sehitoglu // *Acta Materialia* **55** (2007) 6843.
- [33] E.B. Tadmor, S. Hai // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **51** (2003) 765.
- [34] S. Ogata, J. Li, S. Yip // *Physical Review B* **71** (2005) 224102.
- [35] П.Г. Черемской, В.В. Слезов, В.И. Бетехтин, *Поры в твердом теле* (Энергоатомиздат, М., 1990).
- [36] V.A. Lubarda, M.S. Schneider, D.H. Kalantar, B.A. Remington, M.A. Meyers // *Acta Materialia* **52** (2004) 1397.
- [37] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Reviews on Advanced Materials Science* **11** (2006) 46.
- [38] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Journal of Physics: Condensed Matter* **18** (2006) L225.
- [39] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, *Interfaces in crystalline materials* (Clarendon Press, Oxford, 1995).
- [40] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Philosophical Magazine* **86** (2006) 1415.
- [41] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Philosophical Magazine* **86** (2006) 3487.
- [42] X.-L. Wu, Y.T. Zhu, E. Ma // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 121905.
- [43] R.J. Asaro, S. Suresh // *Acta Materialia* **53** (2005) 3369.

## PROCESSES OF NANOSCALE IDEAL PLASTIC SHEAR IN DEFORMED NANOCRYSTALLINE MATERIALS AND NANOWIRES

S.V. Bobylev<sup>1,2,3\*</sup>, I.A. Ovid'ko<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>2</sup>St. Petersburg State University, St. Petersburg, 198504, Russia

<sup>3</sup>Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, 199178, Russia

\*e-mail: bobylev.s@gmail.com

**Abstract.** The paper describes theoretical models of plastic deformation based upon a conception of nanoscale ideal shear serving as an alternative to the standard mechanism of lattice dislocation nucleation. A model of new physical mechanism of plastic flow in fcc nanowires through nucleation and evolution of sub-surface nanodisturbances is considered. Also the effect of sub-surface nanodisturbances on deformation nanotwins generation is investigated. The model of lattice and grain-boundary dislocation emission from pores in nanocrystalline materials via nanoscale ideal shear under the action of realistically achievable stresses is proposed.

*This work was supported by the Russian Science Foundation (grant 14-29-00199).*

### References

- [1] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **54** (2006) 2489.
- [2] T. Saito, T. Furuto, J.-H. Hwang, S. Kuramoto, K. Nishino, N. Suzuki, R. Chen, A. Yamada, K. Ito, Y. Seno, T. Nonaka, H. Ikehata, N. Nagasako, C. Iwamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma // *Science* **300** (2003) 464.
- [3] T. Saito, T. Furuto, J.-H. Hwang, S. Kuramoto, K. Nishino, N. Suzuki, R. Chen, A. Yamada, K. Ito, Y. Seno, T. Nonaka, H. Ikehata, N. Nagasako, C. Iwamoto, Y. Ikuhara, T. Sakuma // *Materials Science Forum* **426–432** (2003) 681.
- [4] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Materialia* **56** (2008) 1642.
- [5] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov, E. Kaxiras // *Physical Review B* **62** (2000) 3099.

- [6] N. Bernstein, E.B. Tadmor // *Physical Review B* **69** (2004) 094116.
- [7] R.W.K. Honeycombe, *The plastic deformation of metals* (Edward Arnold, London, 1968).
- [8] M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, J.N. Florando, W.D. Nix // *Science* **305** (2004) 986.
- [9] J.R. Greer, W.D. Nix // *Physical Review B* **73** (2006) 245410.
- [10] J.R. Greer // *Reviews on Advanced Materials Science* **13** (2006) 59.
- [11] S. Brinckmann, J.-Y. Kim, J. R. Greer // *Physical Review Letters* **100** (2008) 155502.
- [12] A.T. Jennings, M.J. Burek, J. R. Greer // *Physical Review Letters* **104** (2010) 135503.
- [13] Z.W. Shan, R. Mishra, S.A. Syed Asif, O.L. Warren, A.M. Minor // *Nature Materials* **7** (2007) 115.
- [14] H. Bei, S. Shim, E.P. George, M.K. Miller, E.G. Herbert, G.M. Pharr // *Scripta Materialia* **57** (2007) 397.
- [15] A. Cao, Y. Wei // *Physical Review B* **74** (2006) 214108.
- [16] H.S. Park, K. Gall, J.A. Zimmerman // *Physical Review Letters* **95** (2005) 255504.
- [17] E. Rabkin, D.J. Srolovitz // *Nano Letters* **7** (2007) 101.
- [18] T. Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall // *Physical Review Letters* **100** (2008) 025502.
- [19] H. Tang, K.W. Schwarz, H.D. Espinosa // *Physical Review Letters* **100** (2008) 185503.
- [20] G. Richter, K. Hillerich, D.S. Gianola, R. Mönig, O. Kraft, C.A. Volkert // *Nano Letters* **9** (2009) 3048.
- [21] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **103** (2009) 135501.
- [22] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B* **83** (2011) 054111.
- [23] Y. Kurui, Y. Oshima, M. Okamoto, K. Takayanagi // *Physical Review B* **79** (2009) 165414.
- [24] M.J. Lagos, F. Sato, D.S. Galvão, D. Ugarte // *Physical Review Letters* **106** (2011) 055501.
- [25] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.J. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang // *Physical Review Letters* **102** (2009) 045503.
- [26] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 211901.
- [27] L. Sun, A.V. Krashennnikov, T. Ahlgren, K. Nordlund, F. Banhart // *Physical Review Letters* **101** (2008) 156101.
- [28] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Wiley, New York, 1982).
- [29] I.A. Ovid'ko // *Physical Review Letters* **88** (2002) 046103.
- [30] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Physical Review B* **66** (2002) 245309.
- [31] F. Glas // *Physical Review B* **74** (2006) 121302(R).
- [32] S. Kibey, J.B. Liu, D.D. Johnson, H. Sehitoglu // *Acta Materialia* **55** (2007) 6843.
- [33] E.B. Tadmor, S. Hai // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **51** (2003) 765.
- [34] S. Ogata, J. Li, S. Yip // *Physical Review B* **71** (2005) 224102.
- [35] P.G. Cheremskoy, V.V. Slezov, V.I. Betehtin, *The pores in solid* (Energoatomizdat, M., 1990). (In Russian).
- [36] V.A. Lubarda, M.S. Schneider, D.H. Kalantar, B.A. Remington, M.A. Meyers // *Acta Materialia* **52** (2004) 1397.
- [37] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Reviews on Advanced Materials Science* **11** (2006) 46.
- [38] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Journal of Physics: Condensed Matter* **18** (2006) L225.
- [39] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, *Interfaces in crystalline materials* (Clarendon Press, Oxford, 1995).
- [40] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Philosophical Magazine* **86** (2006) 1415.
- [41] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Philosophical Magazine* **86** (2006) 3487.
- [42] X.-L. Wu, Y.T. Zhu, E. Ma // *Applied Physics Letters* **88** (2006) 121905.
- [43] R.J. Asaro, S. Suresh // *Acta Materialia* **53** (2005) 3369.