

*На правах рукописи*



Бачурин Дмитрий Владимирович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ АККОМОДАЦИОННЫХ И  
ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В НАНОСТРУКТУРНЫХ  
МЕТАЛЛАХ**

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Уфа – 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки  
Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук  
(ИПСМ РАН)

Научный консультант: **Назаров Айрат Ахметович,**  
доктор физико-математических наук, заместитель директора  
по научной работе ИПСМ РАН, г. Уфа

Официальные оппоненты: **Романов Алексей Евгеньевич,**  
доктор физико-математических наук, профессор, ведущий  
профессор Национального исследовательского университета  
ИТМО, г. Санкт-Петербург

**Полетаев Геннадий Михайлович,**  
доктор физико-математических наук, профессор, ведущий  
научный сотрудник Алтайского государственного  
технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул

**Еникеев Нариман Айратович,**  
доктор физико-математических наук, старший научный  
сотрудник Уфимского государственного авиационного  
технического университета, г. Уфа

Ведущая организация: Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург

Защита состоится «14» октября 2021 г. в 14.00 часов на заседании  
диссертационного совета Д 002.080.03 при Федеральном государственном  
бюджетном учреждении науки Институте проблем сверхпластичности металлов  
Российской академии наук, расположенном по адресу: 450001, Уфа,  
ул. Ст. Халтурина, 39.

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим высылать  
по адресу: 450001, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Ст. Халтурина, 39,  
ученому секретарю диссертационного совета. Факс: +7 (347) 282-37-59.  
С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте ИПСМ  
РАН по адресу: <http://www.imsp.ru/>

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2021 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
кандидат технических наук



Саркеева Айгуль Анваровна

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Физика нанокристаллов является одним из важнейших и интенсивно развивающихся разделов нанотехнологии. Впервые очерченная Фейнманом в 1959 году [1], она получила особенно бурное развитие в 80-х и 90-х годах прошлого столетия [2-4]. Наноструктурными или нанокристаллическими материалами называют поликристаллы с размером зерен менее 100 нм в одном из направлений. Интерес к наноструктурным металлам как со стороны исследователей, так и различных отраслей промышленности, вызван, прежде всего, их необычными механическими, теплофизическими, оптическими, электрическими и магнитными свойствами. Эти свойства, главным образом, связаны с большой, по сравнению с обычным крупнозернистым состоянием, объемной долей границ зерен и тройных стыков.

Для получения наноматериалов используются различные методы, включающие в себя интенсивное механическое воздействие, приводящее к измельчению зерен, компактирование нанопорошков, кристаллизацию из аморфного расплава, газовую конденсацию и т.д. Общим свойством полученных всеми этими методами нанокристаллических материалов является неравновесность границ зерен, которая обусловлена неравновесным характером процесса приготовления. Неравновесное состояние границ зерен характеризуется дальнедействующими полями упругих напряжений и избыточной упругой энергией [3, 5]. В зависимости от метода приготовления, нанокристаллы могут обладать различным видом неравновесной структуры. Так, для нанокристаллов, полученных методом интенсивного механического воздействия, характерна высокая плотность внесенных зернограницных дислокаций, что связано с поглощением границами решеточных дислокаций в процессе деформирования, образованием дисклинаций в стыках зерен. Для метода компактирования и кристаллизации из аморфного расплава типичным является образование границ зерен с неоптимизированным жестким сдвигом, а также наличие пористости. На свойства нанокристаллов влияет состояние границ зерен, их взаимодействие с дефектами, а также их способность релаксировать при деформации. При повышенных температурах в неравновесных границах зерен происходят аккомодационные процессы, приводящие к формированию более равновесной структуры, связанные с понижением уровня внутренних напряжений и играющие существенную роль в стабильности и эволюции как механических, так и физических свойств наноматериалов [3].

Прочность и пластичность материалов существенным образом зависят от того, как легко решеточные дислокации могут проходить через границы

зерен, которые представляют собой препятствия при движении дислокаций. Одним из актуальных вопросов является исследование взаимодействия между решеточными дислокациями и границами зерен в трехмерных материалах и формулировка геометрических критериев для перехода дислокаций через границы из одного зерна в другое.

Дислокации в крупнозернистых материалах являются основными носителями пластической деформации. При уменьшении размера зерен происходит блокировка источников, где могли бы зародиться дислокации. Последнее означает, что деформационные механизмы в нанокристаллических материалах должны иметь несколько иную природу. Поскольку границы зерен являются “слабым звеном” нанокристаллической структуры, то изначально зарождение трещин, как правило, происходит именно в них. В связи с этим, актуальным представляется исследование влияния разориентировок границ зерен на межзеренное разрушение, что открывает возможность улучшения механических свойств материала путем проектирования границ зерен в соответствии с концепцией зернограницной инженерии [6]. Из-за ограничений методов синтеза наличие избыточного свободного объема и пор нанометрового размера в границах зерен является характерной чертой и в то же время “ахиллесовой пятой” наноструктурных материалов, поэтому выяснение влияния такого неравновесного состояния границ на упругие и пластические свойства материала представляет собой актуальную задачу. Не менее важным как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения является исследование зависимости упругих свойств нанокристаллических металлов от величины и направления предварительной деформации.

Необходимое понимание аккомодационных и деформационных процессов может быть достигнуто на разных уровнях, в частности, методом дискретно-дислокационного моделирования, а также методом молекулярной динамики. Развитие вычислительных мощностей и методов компьютерного моделирования вкпе с разработкой потенциалов межатомного взаимодействия открывает возможность более глубокого понимания процессов, происходящих на микроуровне и в очень коротких временных интервалах, недоступных для экспериментальных исследований.

**Целью диссертационной работы** является выяснение закономерностей аккомодационных и деформационных процессов в наноструктурных металлах.

Для достижения поставленной цели решались **следующие задачи**:

1. Исследование кинетики аккомодации стенок краевых дислокаций в тонких пленках.

2. Построение моделей и исследование кинетики аккомодации двух типов неравновесной структуры границ зерен в наноструктурных материалах: квадрупольных стыковых дисклинаций и неоптимизированного жесткого сдвига.

3. Выяснение и уточнение критериев прохождения решеточных дислокаций через границы зерен.

4. Исследование деформационного поведения наноструктурного материала при одноосном нагружении, а также изучение влияния разориентировок границ зерен на межзеренное разрушение.

5. Исследование упругой и пластической анизотропии при деформации наноструктурного материала, а также изучение влияния внутренних напряжений на деформационное поведение.

6. Исследование деформации пористого наноструктурного материала при одноосном нагружении, а также изучение влияния распределения пор на его деформационное поведение.

#### **Научная новизна:**

Построена модель и исследована кинетика аккомодации стенок краевых дислокаций в тонких пленках. Установлена скорость вращения зерен в зависимости от полутолщины пленки, впервые показано, что после полной релаксации в стенке остается определенное ненулевое количество дислокаций.

Предложена модель аккомодации неоптимизированного жесткого сдвига границ зерен как механизма возврата в нанокристаллах с размером зерен менее 20 нм, включающего диффузионный перенос вещества вдоль границ, и впервые проведено исследование кинетики оптимизации жесткого сдвига.

Построена модель и проведено детальное исследование кинетики аккомодации квадрупольных стыковых дисклинаций, образующихся при пластической деформации наноструктурного материала и являющегося основным элементом их неравновесной структуры. Построена иерархия характерных времен зернограницного возврата в зависимости от размера зерен.

Исследовано взаимодействие решеточных дислокаций с малоугловыми и большеугловыми симметричными границами наклона. Сформулированы критерии прохождения дислокации через границы зерен.

Исследованы деформационные механизмы при одноосном нагружении в нанокристаллическом палладии при комнатной температуре и различных скоростях деформации. Установлено влияние разориентировок границ на межзеренное разрушение при одноосном растяжении.

Впервые изучена упругая и пластическая анизотропия, возникающая при одноосной деформации наноструктурного палладия, а также эволюция модуля Юнга при деформации вдоль различных направлений. Выяснено, что

внутренние напряжения могут влиять на деформационное поведение наноструктурного материала.

Изучены деформационные механизмы при одноосном сжатии в пористом нанокристаллическом палладии при комнатной температуре. Исследовано влияние размера пор на упругие постоянные материала. Установлено, что распределение пор в нанокристаллической структуре оказывает существенное влияние на ее деформационное поведение.

#### **Научная и практическая ценность.**

Полученное время аккомодации стенок краевых дислокаций в тонких пленках может быть использовано для анализа вращения зерен в наноструктурных и ультрамелкозернистых материалах. Выражения для времен аккомодации различных компонент неравновесной структуры границ зерен могут быть полезны при оценке продолжительности возврата зернограницной структуры и связанных с ней свойств нанокристаллических материалов. Сформулированы критерии, определяющие возможность прохождения решеточных дислокаций через границы зерен, имеющие важное значение при анализе деформационного поведения металла. Исследование деформационных механизмов в нанокристаллическом палладии с нанометровым размером зерен вносит значительный вклад в их понимание. Установленное влияние разориентировок границ на межзеренное разрушение палладия будет полезным с точки зрения повышения стойкости материалов к разрушению, сформулированной в концепции зернограницной инженерии. Изученная упругая и пластическая анизотропия нанокристаллического палладия, возникающая при деформации вдоль различных направлений, может играть существенную роль в высокочастотных устройствах. Исследование влияния внутренних напряжений на деформационное поведение нанокристаллического палладия может быть полезным при анализе его механических свойств. Изучение влияния размера пор и их распределения в структуре на упругие постоянные и на деформационное поведение наноструктурного палладия играет важную роль в прогнозировании его деформационного поведения.

**Достоверность** результатов и выводов диссертации обусловлены использованием широко известного и уже хорошо себя зарекомендовавшего метода молекулярной динамики, и применением апробированных и надежных потенциалов межатомного взаимодействия. Метод диффузионного переноса вещества и дискретно-дислокационный подход, применяемые в работе, также интенсивно используются в научном сообществе для решения широкого круга задач физики твердого тела.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Кинетика аккомодации стенок краевых дислокаций в тонких пленках, показывающая уменьшение скорости и полное прекращение стока дислокаций на поверхности и сохранение метастабильного состояния стенок с конечным числом дислокаций.

2. Модели и кинетика аккомодации двух типов неравновесной структуры границ зерен в наноструктурных материалах: неоптимизированного жесткого сдвига и квадруполья стыковых дисклинаций.

3. Закономерности взаимодействия решеточных дислокаций с малоугловыми и большеугловыми симметричными границами наклона, критерии прохождения дислокаций через границы зерен.

4. Закономерности деформационного поведения наноструктурного палладия при одноосном нагружении и влияние разориентировок границ зерен на межзеренное разрушение.

5. Утверждение о наличии упругой и пластической анизотропии при деформации наноструктурного палладия и влиянии внутренних напряжений на его деформационное поведение.

6. Закономерности деформации пористого наноструктурного палладия при одноосном нагружении и влияние распределения пор на его деформационное поведение.

### **Апробация работы.**

Результаты настоящей диссертационной работы были доложены на следующих отечественных и международных научных конференциях и семинарах: международной конференции “Современное состояние теории и практики сверхпластичности материалов”, посвященной 15-летию ИПСМ РАН (Уфа, 2000); республиканской конференции студентов и аспирантов (Уфа, 2001); 3-ей Уральской школе-семинаре металловедов-молодых ученых (Екатеринбург, 2001); XVI Уральской школе металловедов-термистов “Проблемы физического металловедения перспективных материалов” (Уфа, 2002); IX Международном семинаре “Дислокационная структура и механические свойства металлов и сплавов” (Екатеринбург, 2002); 2-ом научно-техническом семинаре “Наноструктурные материалы – 2002: Беларусь – Россия” (Москва, 2002); республиканской конференции “Машиноведение, конструкционные материалы и технологии” (Уфа, 2002); международной конференции “Границы раздела в современных материалах” (Москва, 2003); международном симпозиуме «Объемные наноструктурные материалы» (Уфа, 2007, 2009); международном семинаре по микропластичности (Браунвальд, Швейцария, 2007); международном семинаре «Пластичность нанокристаллических металлов» (Бостальзее, Германия,

2008, 2011); осеннем заседании Общества исследования материалов (Бостон, США, 2008); конференции немецкого физического общества (Дрезден, Германия, 2009); конференции «общества минералов, металлов и материалов» (Сизтл, США, 2010; Сан Диего, США, 2011); семинаре «межатомные потенциалы для переходных металлов и их соединений» (Цюрих, Швейцария, 2010); научной конференции Гордона (Вотервиль, США, 2010); открытой школе-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктуры материалы» (Уфа, 2008, 2014, 2018);

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 38 печатных работ, из которых 16 в рецензируемых журналах, входящих в перечень изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации, в том числе 16 статей - в журналах, индексируемых в международной базе данных Scopus, 15 статей - в журналах, индексируемых в международной базе данных Web of Science (из них - 5 статей в изданиях квартиля Q1).

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, шести оригинальных глав, заключения и списка литературы из 240 наименований. Работа изложена на 250 страницах машинописного текста, содержит 67 рисунков и 5 таблиц.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** дается определение наноструктурных материалов и описываются их преимущества над обычными поликристаллами, вводится понятие неравновесных границ зерен, подчеркивается важность изучения аккомодационных и деформационных процессов, обосновывается актуальность темы диссертации, определяются цель и основные задачи работы, формулируется научная новизна, практическая ценность и основные положения, выносимые на защиту. Приводится краткое описание содержания шести глав диссертационной работы.

### **Глава 1. Аккомодация стенок краевых дислокаций в тонких пленках**

Глава посвящена изучению аккомодации стенок краевых дислокаций в тонкой пленке, которая имеет бесконечные размеры в направлении осей  $y$  и  $z$  и толщину  $L=2h$  вдоль оси  $x$ . Напряжения  $\sigma(d, x, y)$ , действующие со стороны дислокации, находящейся в точке  $(x, y)$  на расстоянии  $d$  от свободной поверхности, рассчитывались при помощи метода виртуальных дислокаций изображения [7], две сетки которых располагаются на каждой из свободных поверхностей. Одна из них содержит дислокации с бесконечно малым вектором

Бюргера, который параллелен оси  $x$ , а другая - оси  $y$ . Дислокационные плотности этих сеток виртуальных дислокаций выбираются таким образом, чтобы удовлетворить всем граничным условиям на поверхности.

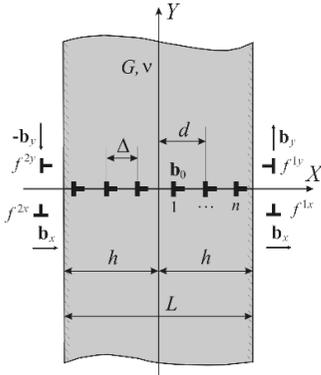


Рис. 1. Схематическое изображение дислокационной стенки в тонкой пленке. Показаны также сетки виртуальных поверхностных дислокаций с различными компонентами вектора Бюргера

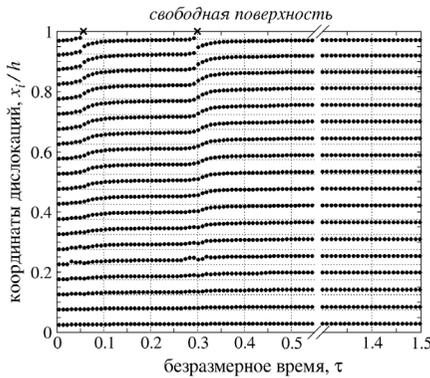
Полагается, что стенка состоит из  $2n_0$  равномерно распределенных краевых дислокаций с равными векторами Бюргера  $b_0$  (параллельными оси  $y$ ) и с начальным расстоянием между ними, равным  $\Delta = h / n_0$  (см. рис. 1). Головные дислокации в начальный момент времени находятся на расстоянии  $\Delta / 2$  от свободных поверхностей. Дислокации прямолинейны и бесконечны вдоль оси  $z$ . Ядра дислокаций и свободные поверхности считаются идеальными стоками и источниками вакансий. Движение дислокаций происходит путем поглощения или испускания вакансий. Локальный химический потенциал в источниках и стоках считается равновесным при нормальных напряжениях. Численный расчет скоростей переползания дислокаций производился при помощи метода Рунге-Кутте второго порядка. Вместо прямого вычисления напряжений на каждом шаге была использована сетка напряжений, рассчитанная для двух независимых переменных  $d$  и  $x$ . Для вычисления напряжений в некоторой точке, лежащей между узлами сетки, применялся метод двумерной линейной интерполяции.

В момент времени, когда головные дислокации достигают поверхности, они исключаются из рассмотрения, и  $n_0$  уменьшается на единицу, затем весь процесс повторяется уже с  $n_0 - 1$  дислокационными парами. Таким образом, аккомодация продолжается до тех пор, пока последняя дислокация не достигнет поверхности и не исчезнет, что приведет к уменьшению до нуля угла разориентировки, то есть полному совпадению двух зерен. Результаты численного моделирования показали, что существует два различных типа

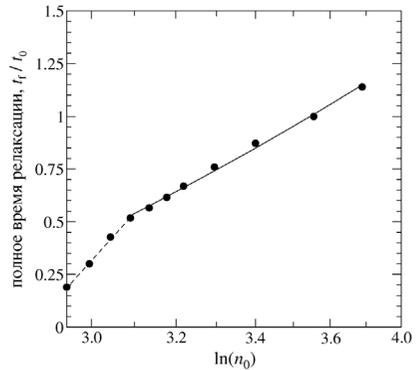
поведения дислокаций в зависимости от начального числа дислокационных пар в стенке: случай, когда  $n_0 \leq 18$  (1) и  $n_0 > 18$  (2).

(1) Одиночная дислокация находится в метастабильном равновесном состоянии в центре пленки. Все дислокационные пары, изначально равномерно распределенные по толщине пленки, незначительно переползают вдоль границы и останавливаются в метастабильных точках равновесия, так и не сумев достигнуть свободной поверхности.

(2) Головные дислокации выходят на свободную поверхность до тех пор, пока число дислокационных пар в границе не станет равным 18. После этого оставшиеся дислокации останавливаются в метастабильных точках равновесия, которые совпадают с найденными для случая  $n_0 = 18$ . На рис. 2а представлен процесс аккомодации стенки, содержащей изначально  $n_0 = 20$  дислокационных пар, где показано положение всех дислокаций в зависимости от безразмерного времени  $\tau$ . В течение всего процесса аккомодации (до тех пор, пока все дислокации не займут метастабильные положения) равномерное распределение дислокаций сохраняется практически по всей толщине пленки, причем междислокационное расстояние лишь незначительно уменьшается при движении от центра пленки к поверхности.



(а)



(б)

Рис. 2. (а) Зависимость координат дислокаций  $x_i/h$  от безразмерного времени. Горизонтальные пунктирные линии показывают начальные положения дислокаций в стенке. Крестиками показаны времена, когда 20-я и 19-я дислокационные пары достигли свободной поверхности. (б) Зависимость полного времени аккомодации (промежуток времени, когда 19-я дислокация достигнет поверхности) от начального числа дислокационных пар  $n_0$ .

Зависимость полного времени аккомодации от начального числа дислокационных пар  $n_0$  показана на рис. 2б. Линейный закон (с логарифмической осью абсцисс) хорошо выполняется для значений  $n_0 > 22$ . Эмпирическое выражение для полного времени аккомодации  $t_f$  для стенки краевых дислокации в тонкой пленке имеет вид:

$$\frac{t_f}{t_0} = -2.68 + 1.04 \ln\left(\frac{h\theta}{b_0}\right), \quad (1)$$

где  $t_0$  зависит от параметров материала и от длины границы. Таким образом, время аккомодации для заданной толщины пленки пропорционально логарифму угла разориентировки.

Оценки времени аккомодации, проведенные при помощи выражения (1), хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными при вращении металлических шариков, а также при анализе эволюции разориентировок границ зерен в алюминиевом ультрамелкозернистом сплаве.

## **Глава 2. Аккомодация неравновесной структуры границ зерен в нанокристаллах**

Глава посвящена изучению кинетики аккомодации неравновесной структуры границ зерен, обусловленных (1) неоптимизированным жестким сдвигом путем диффузионного переноса вещества вдоль границ зерен и (2) квадруполем стыковых дисклинаций в рамках дискретно-дислокационной модели. Первый тип неравновесной структуры характерен для наноматериалов, полученных компактированием и методом кристаллизации из аморфного состояния, а второй является наиболее типичным для нанокристаллов, полученных методом интенсивной пластической деформации.

(1) Предположим, что все зерна в модельном нанокристалле имеют гексагональную форму, и рассмотрим один кристаллит (см. рис. 3). Пусть жесткий сдвиг неоптимизирован вдоль обеих горизонтальных границ этого кристаллита. Это означает, что рассматриваемое зерно сдвинуто по отношению к кристаллической решетке матрицы на некоторую величину  $\Delta$  от положения, в котором границы имеют минимальную энергию и структуру, характерную для бикристалла. Образование границ зерен с неоптимизированным жестким сдвигом представляется естественным при случайном контакте зерен, растущих из расплава или аморфной матрицы. Следовательно, на рассматриваемое зерно действует сила  $F$ , сдвигающая его вдоль оси OZ к положению наилучшего совпадения. Действующая на зерно сила на единицу длины в направлении, нормальном к плоскости рисунка, равна  $2F = 2\sigma L$ , где  $L$  – длина границы. В

результате такого сдвига возникнут области сжатия (темные) и области растяжения (светлые), которые будут создавать соответствующие напряжения. Эти напряжения могут релаксировать путем диффузионного переноса вещества из сжатых областей (граница O'B) в области растяжения (граница OA) вдоль горизонтальных границ. Границы с образовавшимися несплошностями будут генерировать вакансии, стоком для которых будут являться границы с областями перекрытия. В результате действия этого механизма горизонтальные границы примут наименьшее значение энергии, и действующая на зерно сила исчезнет. Будем считать, что этот процесс контролируется диффузионным переносом материала вдоль границ зерен из областей сжатия в области растяжения

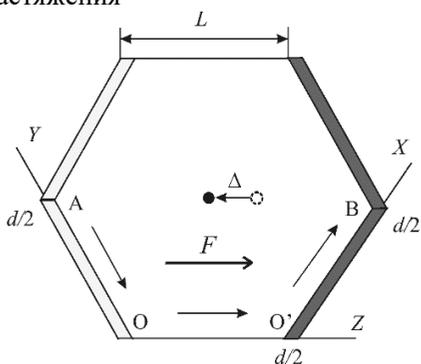


Рис. 3. Схема, иллюстрирующая механизм аккомодации жесткого сдвига в гексагональном зерне. Темные области испытывают напряжение сжатия, а светлые – растяжения. Стрелками показано направление потока вакансий.

Расчет в рамках континуальной теории показал, что аккомодация жесткого сдвига происходит по экспоненциальному закону

$$\Delta(t) = \Delta_0 \exp\left(-\frac{t}{t_{rel}}\right), \quad (2)$$

где  $\Delta_0$  – начальное смещение зерна по отношению к положению с минимальной энергией, а  $t_{rel}$  – характерное время аккомодации, определяемое выражением:

$$t_{rel} \approx \frac{kTd^2}{10\delta D_b V_a \alpha}. \quad (3)$$

Здесь  $\delta D_b$  – произведение диффузионной ширины границы на коэффициент зернограницной диффузии,  $V_a$  – атомный объем,  $T$  – температура,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\alpha$  – постоянный множитель. Этот множитель может быть оценен из рассчитанной численными методами зависимости избыточной энергии от величины сдвига вдоль плоскости специальной границы наклона,

например,  $\Sigma=5(210)[001]$ , которая, как показывают расчеты, имеет вид  $\Delta\gamma \approx \alpha\Delta^2$ . В качестве примера, для никеля величина множителя составляет  $\alpha=4,3 \times 10^{18} \text{ Н/м}^4$ .

Оценка времени аккомодации для нанокристаллического Ni и Pd с размером зерен 8 нм по формуле (3) дает: при  $T = 298 \text{ К} - t_{rel} \approx 312$  дней для Ni и  $2,8 \times 10^8$  дней для Pd,  $T = 600 \text{ К} - t_{rel} \approx 0,04$  с для Ni и 1,17 с для Pd.

В работе [8] утверждается, что микроструктура нанокристаллов, полученных методом молекулярной динамики кристаллизацией из расплава, содержит в основном высокоэнергетические границы, которые имеют сильно разупорядоченную (аморфную) атомную структуру. Аморфное состояние границ авторы объясняют тем, что наличие окружения не позволяет границам уменьшить энергию с помощью жесткого сдвига, как в бикристаллах, в результате чего границы остаются в неравновесном состоянии. Молекулярно-динамический “отжиг” (при 600 К для палладия в течение 150 пс) также не привел к какому-либо изменению структуры границ зерен, из чего был сделан вывод о том, что аморфная структура является термодинамически равновесной для высокоэнергетических границ зерен в нанокристаллах. Сравнение с результатами вышеприведенных оценок показывает, что время, в течение которого проводился молекулярно-динамический отжиг палладия в работе [8], оказывается на много порядков меньше времени аккомодации жесткого сдвига. Следовательно, ничего удивительного нет в том, что авторы при моделировании не наблюдали никакой аккомодации.

Таким образом, границы зерен в нанокристаллах могут релаксировать путем жесткого сдвига при достаточно высокой температуре и принять равновесную конфигурацию, обладающую упорядоченной атомной структурой. При комнатной температуре неравновесное состояние границ зерен с неоптимизированным жестким сдвигом может сохраняться в зависимости от материала в течение длительного промежутка времени.

(2) Предложена модель аккомодации квадруполя стыковых дисклинаций, суть которой состоит в следующем. Рассмотрим две конечные стенки сидячих дислокаций, которые эквивалентны квадруполю стыковых дисклинаций (см. рис. 4). Дисклинационный квадруполь характеризуется тремя параметрами: мощностью  $\Omega$  и двумя длинами плеч  $2a_1$  и  $2a_2$ , которые в общем случае не равны друг другу. Обычно как мощность, так и плечи дисклинационного квадруполя в процессе аккомодации могут изменяться. В данной модели длины плеч квадруполя фиксированы и равны расстоянию между стыками, а аккомодация квадруполя происходит только путем уменьшения его мощности благодаря тому, что составляющие его дислокации уходят через тройные

стыки. Рассмотрим такую геометрическую модель поликристалла, чтобы длины плеч дисклинационного квадруполя были равны:  $2a_1 = 2a_2 = 2a = L$ , где  $L$  – длина границы. Начальное значение мощности квадруполя равно  $\Omega_0 = b / h_0$ , где  $b$  – вектор Бюргера зернограницных дислокаций, а  $h_0$  – исходное расстояние между дислокациями. Предположим, что в начальный момент времени дислокации равномерно распределены вдоль границ, причем так, что дислокации, лежащие на противоположных границах, связаны в диполи. При повышенных температурах под действием сил взаимного отталкивания дислокации начинают переползать к стыкам. В них происходит дислокационная реакция, в результате чего сидячие головные дислокации должны расщепиться на скользящие дислокации, которые легко могут покинуть стык путем скольжения. Таким образом, эти головные дислокации могут быть исключены из процесса отжига данного дисклинационного квадруполя. В результате ухода одной дислокации с каждого из четырех стыков, мощность квадруполя уменьшается на величину  $b / a$ , где  $a = L / 2$ . После ухода одной дислокации к каждому стыку подходит следующая, и процесс повторяется. Отсюда ясно, что в целом процесс отжига квадруполя контролируется переползанием зернограницных дислокаций к тройным стыкам, причем плечо квадруполя сохраняется равным длине границы.

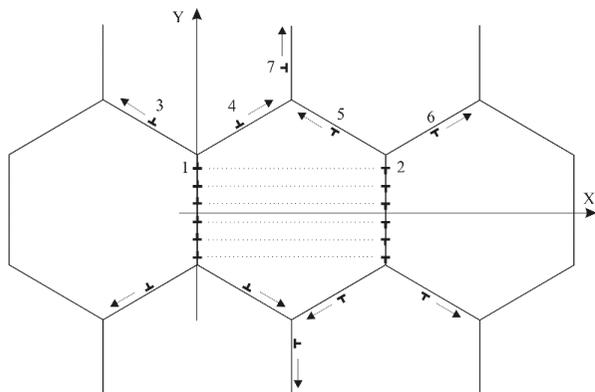


Рис. 4. Схема, иллюстрирующая аккомодацию квадруполя стыковых дисклинаций. Стрелками показаны направления движения дислокаций.

Исследование кинетики аккомодации квадруполя дисклинаций было проведено путем численного решения уравнений движения дислокаций, составляющих квадруполь:

$$\frac{dy_i}{dt} = -\frac{\delta D_b V_a}{bkT} \left( \frac{\sigma_{xx}^{i+1} - \sigma_{xx}^i}{y_{i+1} - y_i} - \frac{\sigma_{xx}^i - \sigma_{xx}^{i-1}}{y_i - y_{i-1}} \right) \quad (4)$$

Численное интегрирование уравнений (4) проводилось с помощью метода Рунге-Кутты второго порядка. На рис. 5 приведены графики зависимости относительной скорости аккомодации  $d\Omega / \Omega dt$  от оставшегося в стенке числа дислокаций  $n$ , где  $\tau$  – нормированное время:  $\tau = [4\delta D_b G V_a / \pi(1-\nu)kTL^3]t$ . Используя стационарное значение  $d\Omega / \Omega dt \approx 6,5$ , можно получить уравнение для изменения мощности дисклинационного квадруполя:

$$\frac{d\Omega}{dt} = -\frac{26\delta D_b G V_a}{\pi(1-\nu)kTL^3} \Omega = -\frac{100\delta D_b G V_a}{kTd^3} \Omega, \quad (5)$$

где было учтено, что в выбранной модели поликристалла зерен  $L = d/2$ , а  $\nu = 0,35$ . Из выражения (5) следует, что мощность квадруполя стыковых дисклинаций убывает по экспоненциальному закону  $\Omega(t) = \Omega_0 \exp(-t/t_s)$  с характерным временем, равным

$$t_s = \frac{kTd^3}{100\delta D_b G V_a}. \quad (6)$$

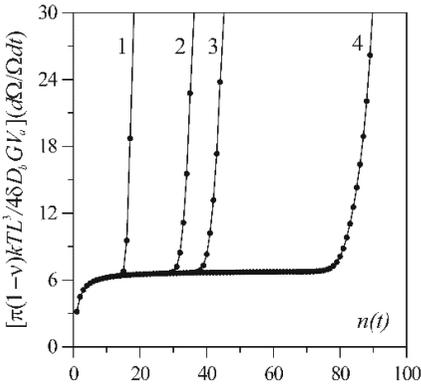


Рис. 5. Зависимость скорости аккомодации квадруполя стыковых дисклинаций от количества оставшихся в квадруполе дислокационных диполей, для различных значений начального количества дислокаций:  $n_0 = 20$  (кривая 1), 40 (2), 50 (3) и 100 (4).

Авторы [9] наблюдали значительную аккомодацию структуры границ зерен и упругих модулей субмикроструктурной меди, полученной методом интенсивной пластической деформации, после отжига образцов в течение одного часа при  $T = 398$  К. Расчет характерного времени аккомодации с помощью выражения (6) для меди дает  $t_s \approx 60$  мин, что хорошо согласуется с экспериментальными данными.

При размере зерен  $d_c \approx 20$  нм отношение времен аккомодации квадруполя стыковых дисклинаций и неоптимизированного жесткого сдвига составляет  $t_{rel}/t_s \approx 9$ . При уменьшении  $d$  это отношение будет увеличиваться. Это

означает, что дисклинационная компонента при размере зерен менее 20 нм играет не столь важную роль, как компонента, связанная с неоптимизированным жестким сдвигом.

Таким образом, аккомодация дисклинационной структуры в деформированных поликристаллах происходит по экспоненциальному закону с характерным временем, пропорциональным кубу размера зерен. В области нанокристаллических размеров зерен ( $d_c \approx 10 - 100$  нм) с уменьшением размера зерен относительная роль дисклинационной компоненты неравновесной структуры границ зерен убывает, в то время как роль неоптимизированного жесткого сдвига, наоборот, возрастает.

### **Глава 3. Взаимодействие решеточных дислокаций с границами зерен**

Глава посвящена изучению взаимодействия решеточных дислокаций с границами зерен. При исследовании использовались две различные модели: (1) квазитрехмерная ячейка для расчета энергии границ зерен, и (2) полностью трехмерная ячейка для моделирования взаимодействия дислокаций с границами. Все молекулярно-динамические расчеты в настоящей и последующих главах проводились с использованием программы IMD.

С помощью модели (1) рассчитаны энергии 17 симметричных границ наклона с осью разориентировки  $[111]$  и углами разориентировки от  $0^\circ$  до  $60^\circ$ . Полученные результаты воспроизведены при помощи дисклинационно-структурной модели, что позволило во всем интервале углов разориентировки достичь практически идеального совпадения результатов с данными молекулярно-динамического моделирования. Кроме того, исследованы асимметричные границы наклона, которые при заданном угле разориентировки характеризуются еще одним параметром, углом инклинации  $\phi$  (поворот плоскости границы вокруг оси разориентировки по отношению к симметричной границе). Оказалось, что во всем интервале углов разориентировки энергия асимметричных границ в среднем на  $0,1 - 0,2$  Дж/м<sup>2</sup> выше энергии соответствующих симметричных границ наклона.

Для модели (2) выбраны три границы: малоугловая симметричная  $\Sigma=57$  ( $\theta=13,17^\circ$ ), малоугловая асимметричная  $\Sigma=57$  ( $\theta=13,17^\circ$ ,  $\phi=30,00^\circ$ ) и большеугловая симметричная  $\Sigma=7$  ( $\theta=38,21^\circ$ ). Ориентация зерна 1 на рис. 6 была одинаковой для всех исследуемых границ зерен, при этом ориентация зерна 2 изменялась в зависимости от угла разориентировки границы. Ядро краевой дислокации в ГЦК решетке никеля на плоскости  $(1\bar{1}\bar{1})$  расщепляется на две частичные дислокации Шокли, которые по их положению по отношению к направлению взаимного движения называются головной и замыкающей.

Входящую в границу полную дислокацию с вектором Бюргерса  $(a_0/2)[101]$  назовем отрицательной, поскольку она уменьшает угол разориентировки границы, а дислокацию с противоположным вектором Бюргерса  $(a_0/2)[\bar{1}0\bar{1}]$  - положительной, поскольку она увеличивает угол разориентировки между двумя кристаллитами. Входящая дислокация вводилась в бикристалл по всем неэквивалентным плоскостям скольжения, возможным для выбранной границы. Моделирование проводилось при начальной температуре 0 К.

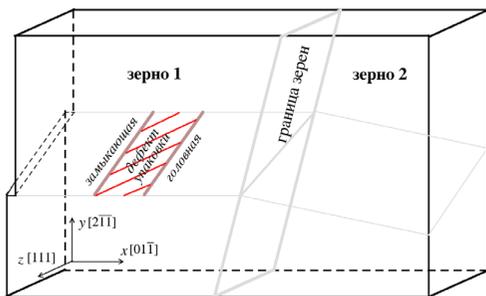


Рис. 6. Схема расчетной ячейки, содержащей два зерна, разориентированных вокруг оси  $[111]$ , для моделирования взаимодействия между решеточными дислокациями и границами зерен. Схематически показаны головная и замыкающая частичные дислокации и дефект упаковки между ними.

На рис. 7а-г показаны четыре характерных этапа взаимодействия между решеточной дислокацией (в данном случае расположенной на плоскости скольжения 1) и границей  $\Sigma=57$ . Рис. 7а изображает момент, когда головная частичная дислокация уже вошла в границу, в то время как замыкающая дислокация частично отталкивается границей и находится на некотором расстоянии от нее. Головная дислокация не может сразу пройти в соседнее зерно, однако несколько ее “зародышей” в виде изогнутых сегментов отчетливо видны между зернограницными дислокациями в зерне 2. В таком виде сегменты существуют до критического напряжения  $\epsilon_{nuc1} \approx 1,04\%$ , после чего первый дислокационный зародыш начинает отрываться от свободной поверхности. В это время другой конец этого дислокационного зародыша по-прежнему зацеплен за сетку зернограницных дислокаций. При достижении критической деформации  $\epsilon_{trans}^{(1)} \approx 1,04\%$  головная частичная дислокация полностью отцепляется от границы и проникает в зерно 2. Точки пересечения плоскости скольжения входящей дислокации с зернограницными дислокациями являются точками, за которые дислокация зацепляется при своем движении (см. рис. 7а). После того как головная дислокация начинает проникать в зерно 2, происходит полное поглощение замыкающей дислокации (рис. 7б).

Дальнейшее увеличение деформации приводит к тому, что головная дислокация полностью проходит в зерно 2 (рис. 7в). После этого сразу в зерне 2 начинается зарождение и прохождение замыкающей частичной дислокации (рис. 7г).

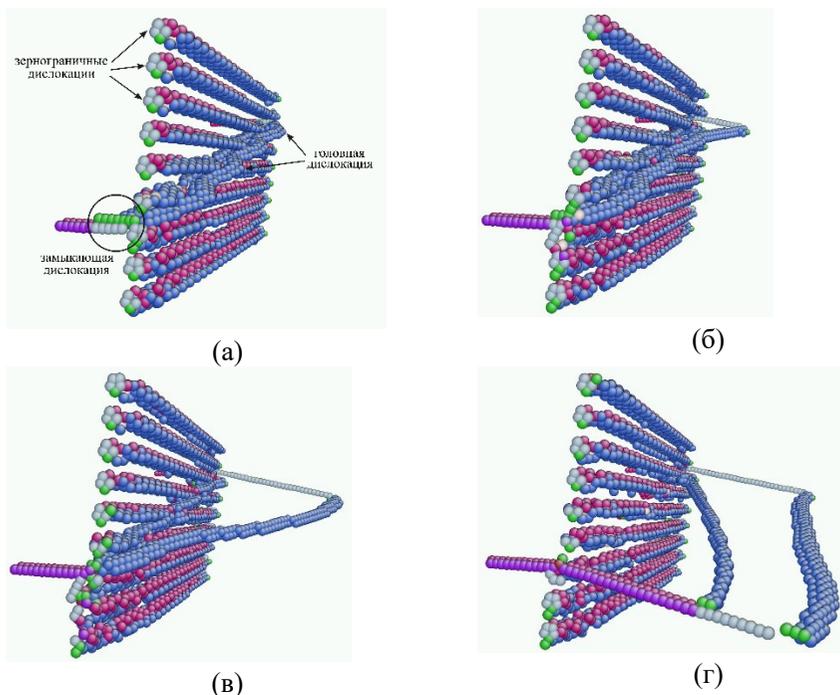


Рис. 7. Взаимодействие „положительной” дислокации с симметричной границей наклона  $\Sigma=57 (\bar{1}8\bar{7})$  ( $\theta=13,17^\circ$ ). Атомы покрашены в соответствии с их координационным числом. Для визуализации дислокации показаны только атомы с координационным числом, меньшим 12. (а) при деформации 0,64% головная дислокация входит в границу зерен, а замыкающая частичная дислокация (обведенная кружком) блокируется границей и не может войти в нее; (б) зарождение головной дислокации на задней свободной поверхности при 1,04%; (в) прохождение головной дислокации в зерно 2 при 1,12%; (г) прохождение замыкающей дислокации в зерно 2 при 1,20%.

Моделирование взаимодействия дислокаций, входящих в границу по плоскостям 2-5, показало, что по всех случаях через границу проходят обе

частичные дислокации. Никаких фундаментальных отличий от подробно описанного выше случая обнаружено не было, за исключением величины деформации, при которой наблюдается прохождение дислокаций.

Критические деформации для прохождения дислокации через асимметричную границу  $\Sigma=57$  ( $\theta=13,17^\circ$ ,  $\varphi=30,00^\circ$ ) оказались сравнимыми с теми, что были обнаружены для симметричной границы  $\Sigma=57$ . Полное прохождение через границу всегда наблюдалось для положительной входящей дислокации. Критические деформации лежали в интервале между 1,04% и 1,28%. Для отрицательной входящей дислокации эти деформации оказались значительно выше (между 1,44% и 2,00%). При этом в двух случаях (плоскости скольжения 4 и 5) прохождения дислокации через границу не наблюдалось.

Большеугловая граница  $\Sigma=7$  ( $\theta=38,21^\circ$ ) пропускает только головную отрицательную дислокацию в зерно 2. Прохождение замыкающей дислокации через границу не наблюдалось по всем пяти входящим плоскостям скольжения. Положительная дислокация полностью поглощается границей и не может пройти в зерно 2 независимо от плоскости скольжения.

Таким образом, установлено, что прохождение дислокации через границу зависит от изменения угла разориентировки между зернами благодаря вектору Бюргера входящей дислокации, угла разориентировки границы и плоскости по которой дислокация входит в границу, в то время как зависимость от угла инклинации асимметричной границы выражена слабо.

#### **Глава 4. Деформационное поведение наноструктурного металла при одноосном нагружении**

Глава посвящена изучению деформационного поведения наноструктурного палладия при одноосном нагружении. Молекулярно-динамическое моделирование деформации проводилось в трехмерном образце, содержащем 100 бездефектных и произвольно ориентированных зерен со средним размером 10 нм. Расчетная ячейка содержит около 4,6 миллиона атомов (см. рис. 8). Перед деформацией образец отжигался в течение 10 пс при температуре 1360 К (85% от температуры плавления для используемого потенциала взаимодействия), а затем выдерживался в течение 20 пс при 300 К. Плотность недеформированного образца при 300 К составляет 96,6% от плотности идеального кристалла. Доля дефектных (с координационными числами, не равными 12) атомов в образце составляет 13,1%. Моделирование проводилось при постоянной температуре 300 К. Периодические граничные условиями использовались во всех трех координатных направлениях.

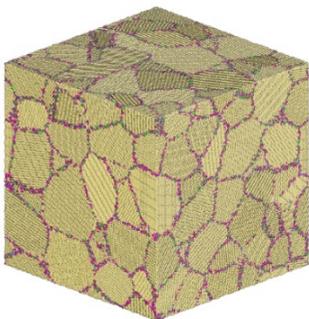
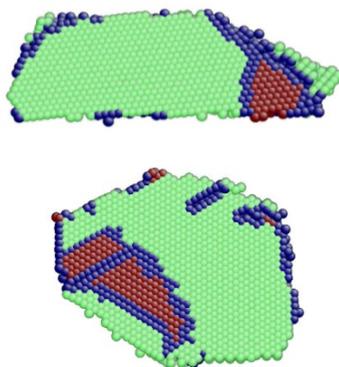
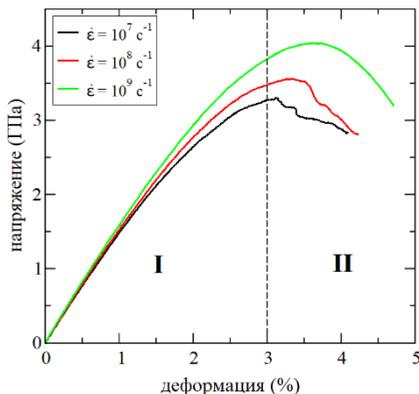


Рис. 8. Трехмерный образец нанокристаллического палладия, содержащий 100 произвольно ориентированных зерен со средним размером 10 нм. Атомы окрашены в соответствии с их координационным числом. Атомы желтого цвета имеют координационное число 12 и соответствуют идеальной ГЦК-решетке.

Одноосное растяжение. На рис. 9а показаны кривые напряжение-деформация при одноосном растяжении. Видно, что у нанокристаллического палладия имеется сильная чувствительность к скорости деформации. Чем выше скорость деформации, тем выше напряжения и тем больше деформация, при которой кривая имеет максимум. Отклонение кривых от линейной зависимости наблюдается при деформации около 0,7%. За упругой областью следует небольшая область пластической деформации. Никаких частичных или полных дислокаций в зернах при этом до 3% растяжения в области I не обнаруживается. Тем не менее, несколько дислокационных зародышей присутствуют в границах зерен (см. рис. 9б). Эти зародыши не обязательно принадлежат одной и той же системе скольжения. Некоторые зародыши возникают после приложения деформации; другие уже существуют в исходной структуре и появляются в результате аккомодации зернограницной структуры; некоторые зародыши, которые существовали в исходной структуре, входят обратно в границу во время деформации. Участки границ, где происходит образование зародышей дислокаций, обычно соответствуют участкам границ, на которых до этого имела место концентрация гидростатического напряжения.

На рис. 9б показаны поперечные сечения различных зерен вдоль плоскостей скольжения (111) при растяжении на 3%. В границах хорошо видны дислокационные зародыши, которые не продвигаются далее в тело зерна. На рис. 9б (внизу) показан единственный случай зарождения полной дислокации, который наблюдался при всех исследованных скоростях деформации. Зарождение полной дислокации начинается с испускания головной частичной дислокации. Замыкающая частичная дислокация после этого зарождается вблизи на границе зерна. Однако, полная дислокация остается в положении, показанном на рис. 9б, в течение всего процесса моделирования и не проходит дальше в зерно. Эта полная дислокация имеет ступеньки, то есть сегменты ее

дислокационной линии находятся более чем на одной плоскости. Фактор Шмида для данной системы скольжения составляет 0,45, а действующее вдоль плоскости скольжения напряжение сдвига равно 1,55 ГПа. Стоит отметить, что в действующей системе скольжения напряжение сдвига не максимально, и в нанокристаллическом образце имеются другие зерна с уже существующими дислокационными зародышами и более высоким напряжением сдвига, в которых эти зародыши не проходят далее в зерно. Такое поведение связано с наличием в границах зерен точек закрепления, которые препятствуют дальнейшему движению этих зародышей.



(а)

(б)

Рис. 9. (а) Кривые напряжения-деформации для нанокристаллического палладия при одноосном растяжении при трех различных скоростях деформации. (б) дислокационная активность в зернах при растяжении 3%. Атомы на (б) окрашены в соответствии с их локальной кристаллической структурой.

Полное отсутствие дислокационной активности в зернах, но явное отклонение от линейной зависимости напряжения от деформации на кривой указывает на активность межзеренных аккомодационных процессов. Действительно, детальное изучение структур показывает наличие сильного локализованного изгиба зерен и упругих смещений вблизи границ (зернограничного проскальзывания), величина которых уменьшается при приближении к центру зерна. Это говорит о том, что процессы аккомодации границ зерен играют важную роль при деформации нанокристаллического палладия.

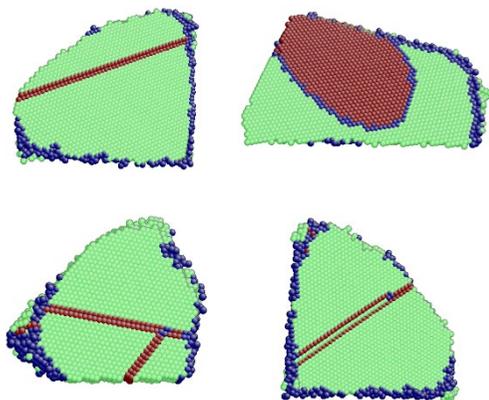
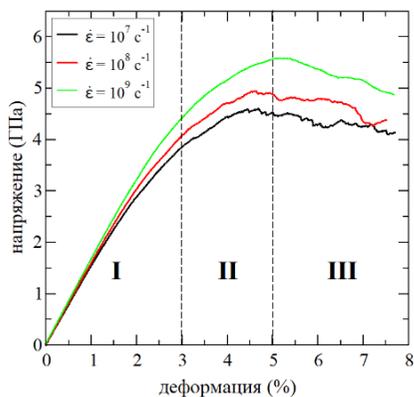
Систематический анализ показал, что зарождение трещин в области II начинается на большеугловых границах зерен с углами разориентировки более  $18^\circ$ , плоскость которых преимущественно ориентирована перпендикулярно направлению приложенной деформации. Межзеренного разрушения на малоугловых границах (с углом разориентировки менее  $15^\circ$ ) не наблюдалось. Подавляющее большинство трещин зарождается на границах зерен смешанного типа. Межзеренное разрушение наблюдалось только в шести специальных границах в интервале разориентировок от  $37^\circ$  до  $52^\circ$ , при этом  $5 \leq \Sigma \leq 11$ . В малоугловых специальных границах образования трещин не наблюдалось.

Одноосное сжатие. На рис. 10а показаны кривые напряжения-деформации для одноосного сжатия. Как и для случая одноосного растяжения, более высокая скорость деформации приводит к более высокому пределу прочности. Отклонение от линейного наклона начинается при деформации около 1,0%. Никакой активности частичных или полных дислокаций не обнаружено до 3% сжатия, при этом многие зародыши частичных дислокаций находятся в границах зерен. В отличие от растяжения, зарождение дислокаций при сжатии происходит на других границах и в других зернах. Почти в половине всех зерен отсутствуют дислокационные зародыши. В целом, наблюдаемые механизмы деформации в области I очень похожи на механизмы, описанные выше для соответствующей области растяжения.

Испускание частичных дислокаций происходит после 3% сжатия (область II). Первая частичная дислокация, полностью прошедшая через все зерно, наблюдается при 3,46% сжатия, что соответствует 88% от максимального напряжения. Число прошедших через зерно частичных дислокаций значительно увеличивается с увеличением деформации, их общее количество приблизительно пропорционально величине пластической деформации. Скольжение дислокаций происходит не по плоскостям с наибольшим напряжением сдвига.

Одиннадцать прошедших через все зерно частичных дислокаций, два случая пересечения частичных дислокаций и три случая микродвойникования зарегистрировано при 5% сжатия (см. рис. 10б). Зарождение дислокаций в основном происходит вблизи тройных стыков. При множественном скольжении в одном зерне движущаяся вторая частичная дислокация встречает на своем пути дефект упаковки, оставленный первой дислокацией, и не может преодолеть этот барьер при данной величине деформации. Это напоминает ситуацию в субмикроструктурных материалах, где границы зерен препятствуют дальнейшему скольжению дислокаций, тем самым формируя дислокационные скопления, которые приводят к упрочнению материала. При

двойниковании замыкающая частичная дислокация испускается в соседней плоскости скольжения к головной дислокации и оставляет микродвойник позади (один слой ГЦК-атомов зеленого цвета между двумя слоями ГПУ-атомов красного цвета).



(а)

(б)

Рис. 10. (а) Кривые напряжение-деформации для нанокристаллического палладия при одноосном сжатии при трех различных скоростях деформации. На (б) показана активность частичных дислокаций в различных зернах: прошедшая через все зерно головная частичная дислокация при 4% и 5% сжатия (верхний ряд); скольжение по разным плоскостям в одном зерне при 5% сжатия и процесс микродвойникования. Атомы окрашены в соответствии с их локальной кристаллической структурой.

В области III при сжатии более 5% наблюдались все виды дислокационной активности – прошедшие через зерна частичные дислокации, двойникование и полные дислокации. Локализованное образование трещин началось при сжатии около 5% на границах зерен, ориентированных преимущественно параллельно направлению приложенной деформации. Эти трещины были очень маленькими и оставались локализованными в пределах границ зерен. Образование трещин происходит на одних и тех же границах зерна независимо от скорости деформации. Существует связь между расположением зародыша трещин при растяжении и сжатии. Примерно в 50% случаев раскрытие трещин происходит в одних и тех же тройных стыках.

Трещины не распространялись вдоль соседних границ зерен, как это имело место при растяжении. Длина трещин никогда не превышала длину границ.

Для оценки дислокационного вклада в общую пластическую деформацию проводилось суммирование по всем частичным дислокациям, прошедшим полностью или частично через зерна, а также по всем зародышам дислокаций. Оказалось, что  $\varepsilon_{xx}^{total} \approx 0.03\%$  при 4% сжатия и  $\varepsilon_{xx}^{total} \approx 0.7\%$  при 7% сжатия. Таким образом, дислокации не вносят существенного вклада в наблюдаемую пластическую деформацию нанокристаллического палладия. Поэтому скольжение по границам зерен играет важную роль и является основным механизмом деформации между 1% и 7% одноосного растяжения и сжатия.

## **Глава 5. Упругая и пластическая анизотропия при деформации наноструктурного металла**

В данной главе исследуется влияние предварительной деформации на механическое поведение нанокристаллического палладия и возникающая при этом упругая и пластическая анизотропия. На рис. 11а показана кривая напряжение-деформация (красная сплошная линия) для образца нанокристаллического палладия, использованного в предыдущей главе, при сжатии в направлении оси  $x$ . Точки на кривой показывают 3%, 4% и 5% сжатия, из которых была выполнена последующая разгрузка до нуля напряжений. Красные пунктирные линии обозначают кривые разгрузки. Повторное одноосное сжатие в направлении оси  $x$  приводит с разумной точностью к тем же уровням напряжения, что и при первоначальной нагрузке. Соответствующие кривые повторной нагрузки изображены зелеными, синими и фиолетовыми линиями на рис. 11а.

Тщательный анализ показывает, что поведение петель гистерезиса при нагрузке-разгрузке не характерно для крупнозернистых металлов. Во-первых, наблюдается рост гистерезиса кривых нагрузки-разгрузки, который может быть признаком накопления внутренних напряжений. Во-вторых, модули Юнга  $E_{x(e)x}$  при повторном сжатии вдоль оси  $x$  существенно больше по сравнению с начальным модулем (см. рис. 12). Модуль Юнга изменяется в зависимости от величины деформации, из которой была выполнена разгрузка. Максимум  $E_{x1.5x} = 168$  ГПа достигается при повторной нагрузке после разгрузки от деформации 1,5%. После этого модуль Юнга вдоль направления  $x$  снова уменьшается до 161 ГПа при деформации 4% и затем почти не изменяется.

Если повторная деформация после разгрузки происходит вдоль оси  $y$ , перпендикулярной оси первичного деформирования, то наблюдается совсем

другое поведение. Кривые напряжение-деформация для этого случая представлены на рис. 11б. Красной сплошной линией показана кривая напряжение-деформация вдоль оси  $y$ . Зеленые, синие и фиолетовые линии показывают одноосное сжатие вдоль оси  $y$  для образцов, разгруженных соответственно от 3%, 4% и 5% сжатия вдоль оси  $x$ . Увеличение предварительной деформации в направлении  $x$  приводит к уменьшению модуля упругости при повторной нагрузке в направлении  $y$ . На рис. 12 показаны также модули Юнга  $E_{x(\epsilon)y}$ . Их величина практически не изменяется до 1,5% сжатия, а затем начинает линейно уменьшаться. Например, после 6% предварительного растяжения вдоль оси  $x$  модуль Юнга  $E_{x6y} = 119$  ГПа, что на 25% ниже, чем значение модуля Юнга  $E_{x6x}$ .

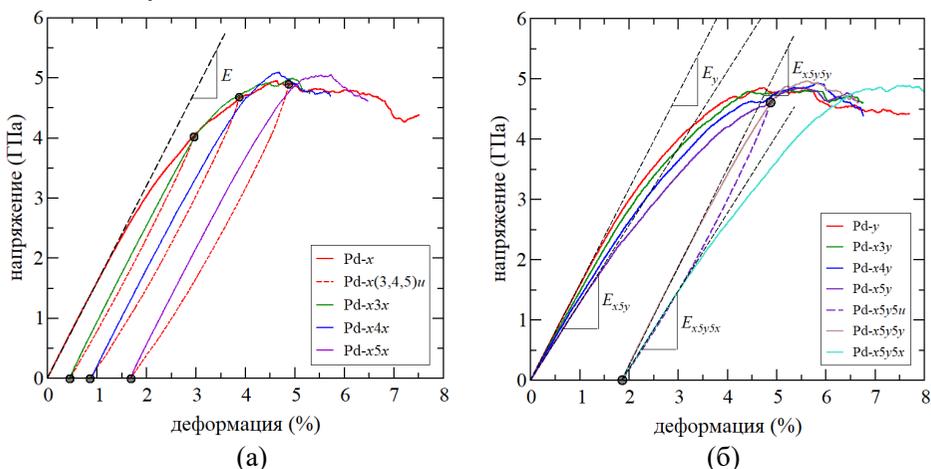


Рис. 11. (а) Кривые напряжение-деформация для одноосной деформации вдоль оси  $x$ . Красная сплошная линия показывает кривую напряжение-деформация при одноосном сжатии вдоль оси  $x$ . Кривые разгрузки отображаются красными пунктирными линиями. Точки на оси абсцисс указывают значения остаточной деформации. (б) Кривые напряжения-деформации для одноосной деформации вдоль оси  $y$  (для наглядности смещены в общем начале координат).

Такая большая анизотропия модуля Юнга оказывается обратимой. Разгрузка образца, который был повторно нагружен вдоль оси  $y$  до деформации сжатия 5%, дает новую начальную конфигурацию для второго повторного сжатия вдоль осей  $x$  или  $y$  (показаны коричневой и светло-синей линиями на

рис. 11б). Соответствующие значения модуля Юнга оказываются в этом случае равными  $E_{x5y5y} = 163$  ГПа и  $E_{x5y5x} = 129$  ГПа (см. рис. 12). Следует обратить внимание, что образец  $Pd-x5y5u$ , повторно нагружаемый вдоль оси  $z$ , демонстрирует модуль упругости  $E_{x5y5z} = 129$  ГПа, который в точности равен  $E_{x5y5x}$  (см. рис. 12). Отметим, что независимо от предыстории деформирования исследуемого образца, максимальное напряжение, которое может быть достигнуто, составляет величину порядка 5 ГПа.

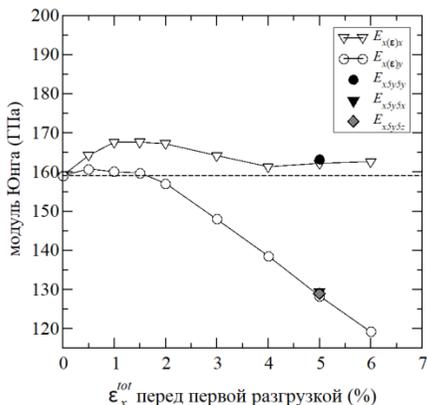


Рис. 12. Модуль Юнга вдоль различных путей нагружения как функция полной деформации перед первой разгрузкой. Горизонтальная пунктирная линия показывает величину  $E_x$  для сравнения.

Выдержка образцов в течение некоторого времени проводилась для выяснения влияния релаксационных процессов, связанных с межзеренными процессами аккомодации. Для этого образцы, одноосно деформированные до 1%, 3% и 5% сжатия, удерживались при фиксированной длине вдоль оси  $x$  в течение 500 пс, в то время как вдоль двух других осей напряжения сохранялись равными нулю, то есть размеры ячейки вдоль них могли свободно меняться. После этого образцы разгружались со скоростью  $10^8$  с<sup>-1</sup>, а затем сразу же снова сжимались вдоль осей  $x$  и  $y$ . Оказалось, что заметных изменений модулей Юнга в обоих направлениях по сравнению с соответствующими образцами без релаксации напряжений не обнаруживается. Однако при этом наблюдается значительное увеличение остаточной деформации по сравнению с немедленно разгруженными образцами. Кроме того, чем больше деформация, тем больше разница между значениями остаточной деформации за тот же период времени.

Анализ показывает, что свободный объем более или менее равномерно распределен по границам зерен в недеформированном образце. Сжатие вдоль оси  $x$  приводит к уменьшению (увеличению) свободного объема на границах, перпендикулярных (параллельных) направлению приложенной деформации.

Последующая разгрузка приводит к частичному возврату свободного объема к его первоначальному равномерному распределению. Однако, границы, плоскость которых параллельна направлению приложенной деформации, все еще имеют бóльший свободный объем, чем те, плоскость которых перпендикулярна направлению деформации.

Наблюдения за миграцией свободного объема позволяют сформулировать простую модель, которая может объяснить такие изменения модуля Юнга. В этой модели предполагается, что дефицит плотности образца, который на 3,4% ниже плотности монокристалла, распределен по границам зерен и тройным стыкам. Если предположить, что зерно имеет квадратную форму, и избыточный свободный объем до деформации приблизительно равномерно распределен по всем границам, то сжатие вдоль оси  $x$  вызывает сжимающие напряжения на границах, перпендикулярных направлению приложенной деформации и растягивающие напряжения в границах, параллельных направлению приложенной деформации. Если избыточный объем может частично мигрировать, что является вполне правдоподобным предположением, то это приводит к миграции свободного объема из сжатых областей в области растяжения. В результате горизонтальные границы будут собирать бóльшее “количество” избыточного свободного объема по сравнению с вертикальными границами зерен. Последующая разгрузка может привести к частичному возврату свободного объема из границ, параллельных направлению деформации, к границам перпендикулярным ему. По сравнению с начальной конфигурацией образец теперь содержит границы зерен с различными атомными плотностями, то есть параллельные и перпендикулярные направлению предварительного сжатия. В этом случае вполне естественно предположить, что менее плотные границы, с бóльшим свободным объемом, также имеют более низкие модули упругости. Таким же образом можно объяснить изменение модуля Юнга при сжатии в перпендикулярном направлении и обратить изменение упругих свойств.

Миграция избыточного свободного объема в границах зерен не носит диффузионный характер. Оценка при помощи выражения для ползучести Кобла, контролируемой зернограницной диффузией, дает характерное время релаксации  $t_c = 2 \times 10^{10}$  с. Это значение на много порядков превышает характерное время  $\tau = 72$  пс, полученное в настоящей главе при аппроксимации зависимости изменения модуля Юнга от времени релаксации напряжений. Данный факт говорит о том, что такая релаксация модуля Юнга в классическом смысле не контролируется диффузионными процессами.

Отдельно проведенное исследование показало, что релаксация внутренних напряжений, связанных с неравновесными границами зерен, приводит к изменению пластической деформации нанокристаллического палладия, а именно к увеличению предела прочности. Релаксация напряжений предварительно деформированной структуры сопровождается уменьшением атомного объема как внутри зерен, так и в границах. Наблюдаемая предельная прочность нанокристаллического палладия, подвергнутого повторному сжатию в том же направлении, увеличивается с увеличением времени релаксации напряжений.

### **Глава 6. Деформационное поведение пористого наноструктурного металла при одноосном сжатии**

В данной главе исследуется деформационное поведение нанокристаллического образца, исследованного в главах 4 и 5, но содержащего случайно распределенные в структуре сферические поры. Пористость  $\nu$  в образце рассчитывалась по количеству атомов, которые фактически были удалены, то есть рассматривалось отношение  $N_{removed} / N_{total}$ , где  $N_{removed}$  – число удаленных атомов, а  $N_{total}$  – полное число атомов в расчетной ячейке.

Было создано девять образцов с тремя различными начальными значениями пористости 1%, 2% и 3% и тремя различными диаметрами пор 1.0, 2.5 и 4.0 нм. Поры диаметром 1.0 нм содержат в среднем 41 вакансию, поры диаметром 2.5 нм – 540 вакансий, самые большие поры диаметром 4.0 нм – 2164 вакансий. Все девять образцов были отожжены в течение 500 пс при температуре 1357°K и затем приведены в равновесие изотермической выдержкой в течение 20 пс при 300°K. Случайное распределение пор в структуре является несколько искусственным и далеким от равновесия состоянием. Однако, нанокристаллические материалы после процесса приготовления всегда находятся в неравновесном состоянии. Поэтому для имитации более равновесных условий и для снятия внутренних напряжений выполнялся “длинный” (в масштабе молекулярной динамики) высокотемпературный предварительный отжиг моделируемых структур.

Оказалось, что при длительном (по сравнению с тем, что проводился в главах 4 и 5) отжигом в структуре появляются двойники отжига, которые часто образуются вблизи тройных стыков. Размер некоторых зерен уменьшается, некоторые полностью исчезают во время отжига, однако общее количество зерен в образце существенным образом не изменяется и находится в интервале от 97 до 104. Распределение зерен по размерам в образце без пор и образцах с

различной пористостью и различным диаметром пор очень похожи, при этом средний размер практически не изменяется и равен 11-12 нм.

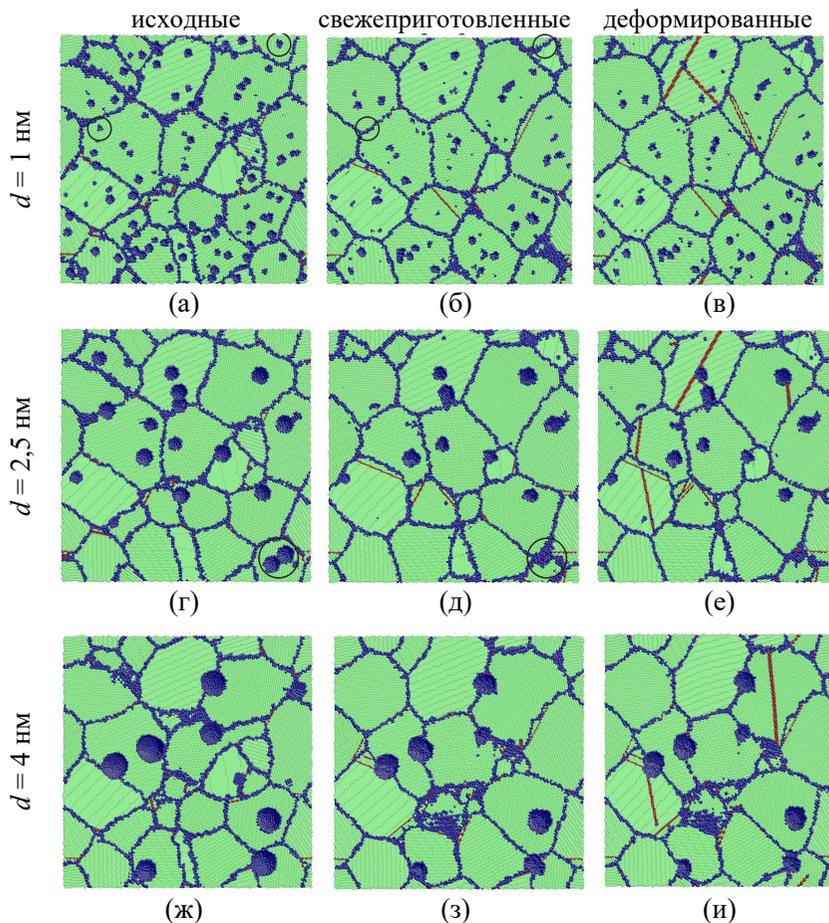


Рис. 13. Одно и то же поперечное сечение пористой структуры палладия: исходные (после создания пор), свежеприготовленные (после отжига в течение 500 пс) и при 5% сжатия: (а-в) Pd<sub>d1v3</sub>; (г-е) Pd<sub>d2.5v3</sub>; (ж-и) Pd<sub>d4v3</sub>. Поры, обведенные кружками, были поглощены мигрирующей границей зерна. Атомы окрашены в соответствии с их локальной кристаллической структурой.

Сравнение нанокристаллических структур палладия в одном и том же поперечном сечении в исходном (после геометрического создания пор) и в свежеприготовленном (после процедуры отжига и выдержки) состояниях показано на рис. 13а-е. Самые маленькие поры диаметром  $d = 1$  нм исчезают после отжига и последующей выдержки, если они расположены в границах зерен (см. рис. 13а, б). Это не зависит от величины начальной пористости. Значительная усадка более крупных пор с диаметром  $d > 1$  нм также наблюдалась на границах зерен, как хорошо видно на рис. 13г, д и 13ж, з. Однако большинство этих крупных пор не исчезают полностью. Поры, расположенные на границах зерен, усаживаются намного сильнее при отжиге, в то время как поры внутри зерен показывают очень незначительную усадку. Независимо от диаметра, поры теряют свою начальную сферическую форму. Некоторые из пор образуют кластеры, содержащие 2-4 поры в образцах с пористостью 2% и 3%. Какой-либо заметной подвижности пор не обнаружено. Поры начинают “чувствовать друг друга” и коалесцировать только в том случае, если они непосредственно соприкасаются. Слияние двух таких пор можно увидеть на рис. 13г, д. Некоторые поры поглощаются мигрирующими границами (см. рис. 13а, б и д, е). Поры служат точками закрепления для мигрирующей границы, и движение последней фактически прекращается, если она на пути встречает пору. После того, как произошла аккомодация пор границей зерна, точки закрепления исчезают, и граница может мигрировать дальше. Образование двойников отжига было обнаружено как в образце без пор, так и в пористых структурах независимо от величины начальной пористости (см. рис. 13а, б, д, е ж, з).

Относительная плотность свежеприготовленных образцов как функция начальной пористости показана на рис. 14. Видно, что увеличение времени отжига с 10 до 500 пс приводит к уплотнению беспористого образца и увеличению относительной плотности  $\rho / \rho_{\text{theo}}$  от 96.7 до 96.9%. Последующая выдержка при комнатной температуре отожженных пористых образцов приводит к потере свободного объема и еще более значительному увеличению относительной плотности. Например, если изначально образец Pd<sub>d4v3</sub> содержал 3% пор, что соответствует  $\rho / \rho_{\text{theo}} = 93.8\%$ , то после выдержки пористость уменьшилась до 2%, а относительная плотность достигла значения  $\rho / \rho_{\text{theo}} = 94.9\%$ . Аккомодация пор меньшего диаметра происходит значительно легче. Это хорошо видно из наклона зависимостей  $\rho / \rho_{\text{theo}}(v)$  на рис. 14.

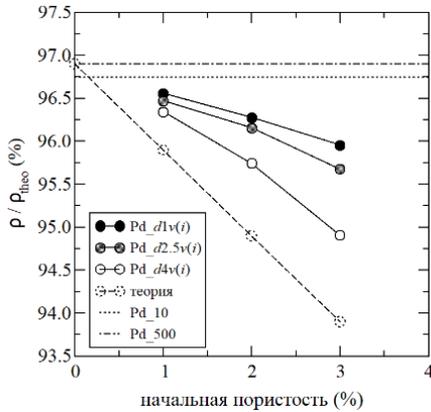


Рис. 14. Относительная плотность образцов палладия как функция начальной пористости. Горизонтальные линии показывают соотношение  $\rho / \rho_{\text{теор}}$  в беспористых образцах с различным временем отжига (10 и 500 пс). Пунктирные точки демонстрируют теоретические значения относительной плотности соответствующие 1%, 2% и 3% начальной пористости.

Исследование механического поведения нанокристаллического палладия при сжатии беспористых образцов показывает, что более длительный отжиг приводит к упрочнению материала. Модули Юнга соответственно равны 159 ГПа и 165 ГПа, а предел прочности 5 ГПа и 5.3 ГПа для образцов Pd\_10 и Pd\_500.

Анализ кривых напряжение-деформация для нанокристаллических образцов с различными диаметрами пор и различной пористостью показал, что чем выше пористость, тем мягче материал. Самые маленькие поры с диаметром  $d = 1$  нм, по крайней мере, до начальной пористости 3%, не оказывают заметного влияния на механическое поведение образца. Большие поры значительно изменяют механическое поведение, причем эти изменения увеличиваются с увеличением диаметра пор.

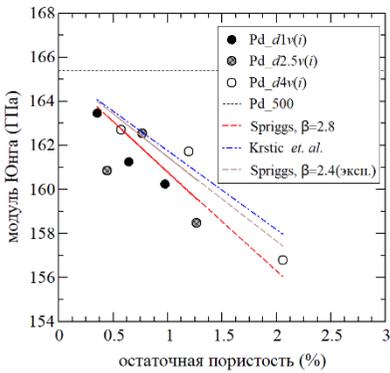
На рис. 15а представлена зависимость модуля Юнга от остаточной пористости. Наименьшее снижение модуля упругости, равное примерно 1%, по сравнению с беспористым образцом, отожженным в течение 500 пс, наблюдалось для Pd\_d1v1, а наибольшее снижение на 3% - для Pd\_d4v3.

Влияние пор на предел прочности показано на рис. 15б. Как видно, предел прочности уменьшается практически линейно с увеличением пористости. Наибольшее снижение предела прочности (около 9%) обнаруживается для образца Pd\_d4v3.

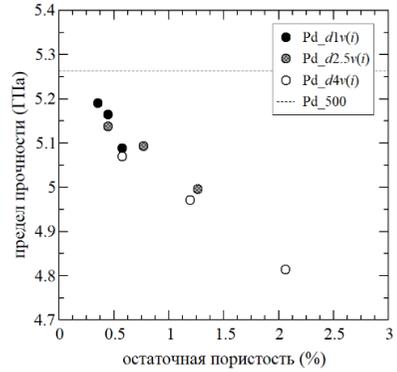
На рис. 15в изображена зависимость коэффициента Пуассона от остаточной пористости. Были рассчитаны обе компоненты  $\nu_{xy}$  и  $\nu_{xz}$ . Здесь  $\nu_{ij}$  — коэффициент Пуассона, который соответствует расширению в направлении  $j$ , когда 1% сжатие происходит в направлении  $i$ . Оказалось, что поры в

нанокристаллических структурах не оказывают существенного влияния на коэффициент Пуассона, по крайней мере, для начальной пористости менее 3% и для диаметра, не превышающего 4 нм.

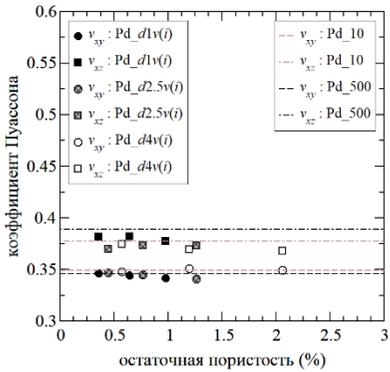
Выяснилось, что наличие пор в структуре, независимо от их диаметра ( $d < 4$  нм) и объемной доли ( $v < 3\%$ ), не способствует более раннему началу дислокационной активности (увеличение доли ГПУ атомов), которая для всех рассмотренных пористых образцов начинается только после 3% сжатия. Однако, после отжига в течение 500 пс в образцах с порами обнаруживается несколько большее число ГПУ атомов по сравнению с беспористым образцом. Доля ГПУ атомов после начала пластической деформации также возрастает быстрее в образцах с порами.



(а)



(б)



(в)

Рис. 15. Модуль Юнга (а), предел прочности (б) и коэффициент Пуассона (в) как функции остаточной пористости для исследованных нанокристаллических образцов.

При деформации не наблюдалось значительной миграции границ зерен. Аналогичным образом, не имела место миграция пор к границам зерен, и не было зарегистрировано ни одного случая зарождения дислокаций с поверхности пор независимо от их положения. Во всех исследованных образцах зарождение частичных дислокаций происходило на границах зерен. Эти дислокации затем распространялись через зерно и поглощались на противоположной границе. Активные системы скольжения в зернах не обладали наивысшим фактором Шмида. Повышенная дислокационная активность наблюдалась в крупных зернах, где зарождение дислокаций происходило в двух или иногда трех разных (111) плоскостях скольжения. Диаметр пор и начальная пористость в образце влияли на дислокационную активность очень локально. Это видно из того факта, что одно и то же зерно в образцах с различной пористостью демонстрировало несколько различную дислокационную активность. Движущиеся частичные дислокации часто останавливались порами, причем чем больше диаметр пор, тем сильнее зацепление частичной дислокации.

Образование локализованных трещин начинается примерно при 5% сжатия на границах зерен, ориентированных преимущественно параллельно направлению приложенной деформации и независимо от величины пористости и диаметра пор, точно так же как в беспористом образце (см. главу 4). На более поздних стадиях одноосного сжатия ( $\varepsilon > 5\%$ ) нанокристаллического палладия обнаруживаются все виды дислокационной активности, а именно частичные дислокации, полные дислокации и миграция двойниковых границ.

Отдельное исследование показало, что распределение пор в нанокристаллической структуре может влиять на ее деформационное поведение. Выяснилось, что поры, расположенные в стыках зерен, облегчают аккомодационные процессы, что вызывает уменьшение модуля Юнга и приводит к упрочнению материала.

### **Основные результаты и выводы:**

1. Если число краевых дислокаций в стенке в тонкой пленке больше некоторого критического числа (в данном случае равного 18), то головные дислокации переползают и достигают свободных поверхностей со скоростью, которая уменьшается по мере уменьшения числа дислокаций. Скорость вызванного этим процессом вращения зерен при этом изменяется обратно пропорционально кубу толщины пленки. Зерна, содержащие границы с менее чем 18 дислокациями, в тонких пленках не вращаются, так как дислокационная стенка релаксирует до метастабильного состояния, и дальнейшего

переползания дислокаций не происходит из-за наличия энергетического барьера. Таким образом, некоторые границы зерен конечного размера в тонких пленках могут оставаться метастабильными, а их вращение может прекращаться при некоторой определенной разориентировке.

2. Квадруполь стыковых дисклинаций является типичным дефектом, обуславливающим неравновесное состояние границ зерен в нанокристаллических материалах, полученных методами интенсивной пластической деформации. Аккомодация мощности и энергии этой системы дисклинаций в деформированных поликристаллах происходит по экспоненциальному закону с характерным временем, пропорциональным кубу размера зерен.

3. Границы зерен с неоптимизированным состоянием жесткого сдвига в нанокристаллах представляют собой один из видов неравновесных границ и при достаточно высокой температуре могут релаксировать путем жесткого сдвига и принять равновесную конфигурацию, обладающую упорядоченной атомной структурой. Аккомодация жесткого сдвига происходит по экспоненциальному закону с характерным временем, пропорциональным квадрату размера зерен. При комнатной температуре неравновесное состояние границ зерен с неоптимизированным жестким сдвигом может сохраняться в зависимости от материала в течение длительного промежутка времени.

4. В зависимости от размера зерен и температуры существует некоторая последовательность характерных времен возврата в границах зерен. В области нанокристаллических размеров зерен ( $d \approx 10\text{--}100$  нм) с уменьшением размера зерна относительная роль дисклинационной компоненты неравновесной структуры границ зерен убывает, в то время как относительная роль неоптимизированного жесткого сдвига возрастает.

5. При взаимодействии решеточных дислокаций с границами наклона в тонких пленках возможность перехода дислокации через границу зависит от того, каким образом входящая дислокация изменяет угол разориентировки. Условно положительная дислокация, которая локально увеличивает разориентацию зерен, может легче пройти через границу по сравнению с отрицательной дислокацией, локально уменьшающей разориентировку между зернами. Различие критической деформации, необходимой для перехода положительной или отрицательной дислокаций через малоугловую границу зерен, может быть объяснено различием изменения энергии границы, вызванной поглощением дислокации. Зарождение первого зародыша частичной дислокации во втором зерне происходит при напряжениях, более низких по сравнению с критическими напряжениями, которые необходимо преодолеть,

чтобы оторваться от точек закрепления. Последние в малоугловых границах представляют собой точки пересечения линий зернограницных дислокации и линии входящей решеточной дислокации. Точки закрепления дислокаций характеризуются повышенными гидростатическими сжимающими напряжениями. Зарождение головной и замыкающей частичных дислокаций не происходит в одном и том же месте границы, а может быть, как ниже, так и выше этого места. Свободные поверхности облегчают процесс зарождения дислокаций и последующее их прохождение через границу. Большеугловые границы зерен оказались практически непроницаемыми для решеточных дислокаций независимо от их знака. Угол инклинации границ зерен не оказывает большого влияния на наблюдаемый механизм перехода дислокаций и незначительно изменяет критические напряжения.

6. При одноосном растяжении в нанокристаллическом палладии практически не наблюдается пластической деформации. Зарождение трещин начинается в основном на большеугловых границах зерен, плоскости которых ориентированы преимущественно перпендикулярно направлению приложенной деформации и в подавляющем большинстве случаев независимо от величины компонент наклона / кручения границы. Малоугловые границы как общего, так и специального типа устойчивы к межзеренному разрушению. Места, в которых образуются трещины, не зависят от скорости деформации. При растяжении никакой дислокационной активности в зернах не наблюдается, несмотря на то, что зародыши дислокаций находятся вблизи границ на плоскостях скольжения с не самым высоким фактором Шмида. Эти зародыши сильно сцеплены с границами зерен. Сильный неоднородный локализованный изгиб внутри зерен является важным механизмом деформации в дополнение к процессам аккомодации границ зерен.

7. При одноосном сжатии нанокристаллического палладия в пластической области наблюдаются частичные дислокации. При более высоких деформациях начинается активность полных дислокаций и двойникование. Вклад дислокаций в общую деформацию незначителен. Основным механизмом деформации является скольжение по границам зерен. Дальнейшее увеличение деформации приводит к зарождению трещин в границах зерен, ориентированных преимущественно параллельно направлению приложенной деформации. Эти трещины небольшие и локализованы в границах зерен.

8. Упругое и пластическое поведение нанокристаллического палладия зависит от истории деформации. Модуль Юнга значительно увеличивается, если направление и знак предыдущей одноосной деформации совпадают с направлением последующей деформации, и уменьшается, если направление

предыдущей одноосной деформации перпендикулярно направлению последующего деформирования. Изменение модуля Юнга зависит от величины предварительной деформации. Некоторые из этих изменений обратимы. Зависимость от деформации и обратимость модуля Юнга объясняется миграцией свободного объема в границах зерен. Релаксация модуля Юнга связана с временным интервалом 0,1 нс, и поэтому может играть существенную роль в устройствах, работающих в гигагерцевых режимах.

9. Внутренние напряжения, связанные с неравновесными границами зерен, могут привести к изменению пластической деформации нанокристаллического палладия, а именно к увеличению предела прочности. Релаксация напряжений предварительно деформированной структуры сопровождается уменьшением атомного объема как внутри зерен, так и в границах. Наблюдаемая предельная прочность нанокристаллического палладия, подвергнутого последующему сжатию в том же направлении, увеличивается с увеличением времени релаксации напряжений.

10. Высокотемпературный отжиг пористого нанокристаллического палладия приводит к росту зерен за довольно короткий промежуток времени. Поры не оказывают какого-либо существенного влияния на рост зерен, однако значительная часть первоначального объема пор, находящихся в границах зерен, аккомодируется. Отжиг приводит к увеличению модуля Юнга и предела прочности. Модуль Юнга и предел прочности уменьшаются линейно с увеличением пористости. Коэффициент Пуассона почти нечувствителен к пористости. Наличие в структуре пор не приводит к более раннему проявлению дислокационной активности по сравнению с беспористым образцом. Большинство дислокаций зарождается в границах зерен. Зарождения дислокаций с поверхности пор не обнаружено.

11. Распределение пор в нанокристаллической структуре может влиять на ее деформационное поведение. Поры, расположенные в стыках, значительно облегчают процессы аккомодации границ зерен, что приводит к уменьшению модуля Юнга и разупрочнению материала. Во время отжига усадка пор в стыках зерен происходит быстрее по сравнению с расположенными внутри зерен. Это приводит к потере порами их первоначального объема, увеличению модуля Юнга и упрочнению при пластической деформации.

### **Цитированная литература**

1. Feynman, R.P. There's plenty of room at the bottom: an invitation to enter a new field of physics // Handbook of Nanoscience, Engineering and Technology. – Boca Raton: CRC Press, 2002. – P. 1-9.

2. Gleiter, H. Nanostructured materials: Basic concepts and microstructure. / H. Gleiter. // *Acta Mater.* – 2000. – V. 48, № 1. – P. 1-29.
3. Nazarov, A.A. In: *Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology* / A.A. Nazarov, R.R. Mulyukov; ed. by W. Goddard D. B., S. Lyshevski and G. Iafrate. – Boca Raton: CRC Press, 2003.
4. Valiev, R.Z. Bulk nanostructural SPD materials with advanced properties, nanostructures: synthesis, functional properties and applications. / R.Z. Valiev, I.V. Aleksandrov; ed. by Tsakalos T. – Moscow: Akademkniga, 2007. – 398 p.
5. Valiev, R.Z. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation / R.Z. Valiev, R.K. Islamgaliev, I.V. Alexandrov. // *Prog Mater Sci.* – 2000. – V. 45, № 2. – P. 103-189.
6. Watanabe, T. An approach to grain-boundary design for strong and ductile polycrystals / T. Watanabe. // *Res Mechanica.* – 1984. – V. 11, № 1. – P. 47-84.
7. Gutkin, M.Y. Straight edge dislocation in a thin 2-phase plate. 1. Elastic stress-fields / M.Y. Gutkin, A.E. Romanov. // *Phys Status Solidi A.* – 1991. – V. 125, № 1. – P. 107-125.
8. Keblinski, P. Amorphous structure of grain boundaries and grain junctions in nanocrystalline silicon by molecular-dynamics simulation / P. Keblinski, S.R. Phillpot, D. Wolf, H. Gleiter. // *Acta Mater.* – 1997. – V. 45, № 3. – P. 987-998.
9. Valiev, R.Z. Structure and properties of ultrafine-grained materials produced by severe plastic-deformation / R.Z. Valiev, A.V. Korznikov, R.R. Mulyukov. // *Mat Sci Eng a-Struct.* – 1993. – V. 168, № 2. – P. 141-148.

**Список публикаций автора по теме диссертации в журналах,  
индексируемых в Scopus, Web of Science:**

1. Bachurin, D.V. Diffusion-accommodated rigid-body translations along grain boundaries in nanostructured materials / D.V. Bachurin, A.A. Nazarov, O.A. Shenderova, D.W. Brenner. // *Mat Sci Eng a-Struct.* – 2003. – V. 359, № 1-2. – P. 247-252.
2. Bachurin, D.V. On the annealing of junction disclinations in deformed polycrystals / D.V. Bachurin, A.A. Nazarov. // *Philos Mag.* – 2003. – V. 83, № 23. – P. 2653-2667.
3. Nazarov, A.A. On the relaxation of quadrupoles of junction disclinations in deformed polycrystals / A.A. Nazarov, D.V. Bachurin. // *Phys Met Metallogr.* – 2003. – V. 96, № 5. – P. 446-451.
4. Bachurin, D.V. Effect of a relative shift induced by an applied stress on the structure and energy of the Sigma 5 (210)[001] tilt boundary in nickel / D.V. Bachurin, A.A. Nazarov. // *Phys Met Metallogr.* – 2004. – V. 98, №1. – P. 9-15.

5. Bachurin, D.V. Relaxation of nonequilibrium grain-boundary structure in nanocrystals / D.V. Bachurin, A.A. Nazarov. // *Phys Met Metallogr.* – 2004. – V. 97, № 2. – P. 133-136.
6. Bachurin, D.V. Accommodation processes during deformation of nanocrystalline palladium / D.V. Bachurin, P. Gumbsch. // *Acta Mater.* – 2010. – V. 58, № 16. – P. 5491-5501.
7. Bachurin, D.V. Molecular dynamics study of plastic deformation of nanocrystalline palladium // In *High Performance Computing in Science and Engineering '09* / Nagel W. Kröner D., Resch M. (eds) – Berlin, Heidelberg: Springer, 2010. – P. 111-122.
8. Bachurin, D.V. Dislocation-grain boundary interaction in  $\langle 111 \rangle$  textured thin metal films / D.V. Bachurin, D. Weygand, P. Gumbsch. // *Acta Mater.* – 2010. – V. 58, № 16. – P. 5232-5241.
9. Bachurin, D.V. Elastic and plastic anisotropy after straining of nanocrystalline palladium / D.V. Bachurin, P. Gumbsch. // *Phys Rev B.* – 2012. – V. 85, № 8. – P. 085407.
10. Bachurin, D.V. Grain rotation by dislocation climb in a finite-size grain boundary / D.V. Bachurin, A.A. Nazarov, J. Weissmuller. // *Acta Mater.* – 2012. – V. 60, № 20. – P. 7064-7077.
11. Bachurin, D.V. Atomistic simulation of the deformation of nanocrystalline palladium: the effect of voids / D.V. Bachurin, P. Gumbsch. // *Model Simul Mater Sc. Eng.* – 2014. – V. 22, № 2. – P. 025011.
12. Danilenko, V.N. In-situ measurements of grain rotation during annealing in ultrafine grained aluminum alloy / V.N. Danilenko, D.V. Bachurin, R.R. Mulyukov. // *Letters on materials.* – 2014. – V. 4, № 4. – P. 233-236.
13. Bachurin, D.V. Influence of internal stresses on deformation behavior of nanocrystalline palladium / D.V. Bachurin. // *Mat Sci Eng a-Struct.* – 2018. – V. 734. – P. 255-259.
14. Bachurin, D.V. Influence of grain boundary misorientation on intergranular fracture of nanocrystalline palladium / D.V. Bachurin. // *Int J Fracture.* – 2018. – V. 214, № 1. – P. 69-78.
15. Bachurin, D.V. Influence of voids distribution on the deformation behavior of nanocrystalline palladium / D.V. Bachurin. // *Solid State Communications.* – 2018. – V. 275. – P. 43-47.
16. Danilenko, V.N. Annealing-induced grain rotation in ultrafine-grained aluminum alloy / V.N. Danilenko, D.V. Bachurin, A.A. Nazarov. // *Rev Adv Mater Sci.* – 2018. – V. 55, № 1-2. – P. 69-77.