

ПЛАСТИЧЕСКАЯ ДЕФОРМАЦИЯ НАНОПРОВОЛОК ПОСРЕДСТВОМ КОЛЛЕКТИВНОГО ЗАРОЖДЕНИЯ НАНОВОЗМУЩЕНИЙ

С.В. Бобылев^{1,2,*}, Д.А. Дружинин², И.А. Овидько^{1,2}

¹Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
Большой пр. В.О., 61, Санкт-Петербург, 199178, Россия

²Математико-механический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет,
Университетский пр. 28, Старый Петергоф, Санкт-Петербург, 198504, Россия

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

Аннотация. Предложен новый физический механизм пластической деформации в нанопроволоках и дано его теоретическое описание. Механизм представляет собой коллективное зарождение и рост нановозмущений – наноскопических областей идеального пластического сдвига с малыми величинами вектора сдвига. Были рассчитаны энергетические характеристики этого процесса и проведено сравнение с классическим зарождением решеточных дислокаций и нашей более ранней моделью схожего механизма. Показано, что режим деформации посредством коллективного зарождения и роста нановозмущений может доминировать в золотых (Au) нанопроволоках при высоких напряжениях и нулевой температуре.

Особенности процессов пластической деформации в нанопроволоках (проволоках наномасштабного размера) в последнее время привлекают повышенное внимание, которое мотивируется их потенциальным применением в современных технологиях; см., например, [1–8]. Особый интерес вызывает размерный эффект – драматический рост механической прочности нанопроволок при уменьшении диаметра. В ряде экспериментов [1–4] показано, что металлические нанопроволоки с диаметром в диапазоне 200–500 нм под действием сжимающих напряжений проявляет прочность в 10–50 раз превосходящую таковую для массивных образцов с тем же химическим составом. Для объяснения этого эффекта Грир и Никс [2, 3] предложили идею дислокационного обеднения (dislocation starvation). Согласно их модели, изначально существующие в нанопроволоке дислокации быстро исчезают, выходя на свободную поверхность, на начальной стадии деформации. В итоге формируется бездислокационная структура, для пластической деформации которой необходимы очень большие механические напряжения. Такое объяснение, в свою очередь, ставит новый вопрос о механизмах пластичности в свободных от дислокаций нанопроволоках. Компьютерные модели [5,6] пластической деформации показали, что в изначально свободных от дефектов механически нагружаемых нанопроволоках дислокации способны зародиться на свободной поверхности. В настоящей работе мы предлагаем альтернативный механизм пластической деформации бездефектных нанопроволок. Механизм представляет собой коллективное зарождение и рост нановозмущений – наноскопических областей идеального сдвига с малыми величинами вектора сдвига,

Данный процесс детально разобран в работе [7]. При этом рассматривалось зарождение одиночного нановозмущения. На практике, однако, можно предполагать, что нановозмущения способны зарождаться целыми ансамблями. Это предположение основано на том факте, что определенные дислокационные конфигурации являются самоэкранированными. Поля дислокаций в таких конфигурациях взаимно компенсируются, и теоретически вполне возможно, что зарождение одиночного нановозмущения менее выгодно, чем ансамбля нановозмущений, организованного в низкоэнергетическую конфигурацию. Примером таких ансамблей являются, например, дислокационные стенки, диполи и т.д.

Рассмотрим процесс пластической деформации в монокристаллической нанопроволоке, имеющей форму вытянутого параллелепипеда с квадратным сечением $d \times d$ (Рис. 1а). В настоящей работе мы рассмотрим ситуацию, когда нановозмущения образуют регулярную структуру, показанную на Рис. 1b–d. В данном случае вместо одиночного нановозмущения синхронно зарождаются N абсолютно одинаковых (как по длине, так и по величине s) нановозмущений (для компактности на Рис. 1 изображен случай с $N=3$), образующих регулярную дислокационную стенку с периодом h . При этом все дислокации находятся на одинаковом расстоянии x от свободной поверхности. Серым цветом на Рис. 1 показаны обобщенные дефекты упаковки. На свободной поверхности образуются ступеньки с шириной равной сдвигу в точках, на которых зародились нановозмущения. Далее мы предполагаем, что нановозмущения синхронно растут (Рис. 1с), в определенный момент трансформируясь в решеточные частичные дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} (Рис. 1d) и затем выходят на свободную поверхность образуя конечную структуру (Рис. 1е).

Рассчитаем изменение энергии ΔW системы, связанное с формированием ансамбля из N нановозмущений в нанопроволоке (Рис. 1). В рамках модели считается, что пластический сдвиг происходит в плоскости, наклоненной под углом 45° к основанию нанопроволоки, под действием сдвигового напряжения τ , действующего в этой плоскости. Нанопроволока предполагается упругоизотропным телом, характеризующимся модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν и находящимся под действием приложенного постоянного растягивающего напряжения. Изменение энергии ΔW , представляющее собой разницу энергий нанопроволоки с ансамблем нановозмущений и исходной бездефектной нанопроволоки, можно представить в следующем виде:

$$\Delta W = N(W_d + W_s + W_\gamma - A) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N W_{\text{int}}^{i-j}, \quad (1)$$

где W_d – собственная энергия дислокации, W_s – энергия ступеньки, образующейся на свободной поверхности при зарождении дислокации, W_γ – энергия обобщенного дефекта упаковки, A – работа напряжения τ по перемещению дислокации, W_{int}^{i-j} – энергия парного взаимодействия двух краевых дислокаций.

Величины W_d , W_s , W_γ и A были рассчитаны в работе [7]. При этом использовалась несколько упрощенная модельная конфигурация, показанная на Рис. 2. При вычислении дислокационной энергии W_d использовалось приближение бесконечной прямолинейной краевой дислокации у свободной поверхности (в полупространстве), поскольку аналитическое выражение для энергии дислокации конечной длины в нанопроволоке квадратного сечения неизвестно.

$$W_{\text{int}}^{i-j} = \frac{Ds^2}{2} \left\{ \frac{4x^{*2}[-4x^{*2} + (y_j - y_i)^2]}{[4x^{*2} + (y_j - y_i)^2]^2} + \ln \left[1 + \frac{4x^{*2}}{(y_j - y_i)^2} \right] \right\}, \quad (6)$$

где y_i ($i = 1, 2, \dots, N$) – координаты дислокаций (см. Рис. 2). В нашем случае дислокации образуют регулярную структуру с одинаковым расстоянием h между всеми дислокациями (см. Рис. 1 и 2). В системе координат на рисунке 2, очевидно, $y_i = (i-1)h$. Выражение (6) найдено для краевых дислокаций с одинаковым вектором Бюргерса s , ориентированным под углом 45° к свободной поверхности (Рис. 2). Параметр $x^* = \min(x, d-x)$ означает, что как и в случае с формулой (2) мы полагаем энергию взаимодействия зависящей от расстояния до ближайшей свободной поверхности.

Таким образом, из (1)–(6) с учетом условия $y_i = (i-1)h$ получаем окончательное выражение для изменения энергии ΔW в виде:

$$\Delta W(x, s) = N \left[\frac{Ds^2}{2} \left(\ln \frac{x^*}{s} + 1 \right) + \gamma_s s + \gamma_{gsf}(s) x / \sqrt{2} - \tau s x / \sqrt{2} \right] + \frac{Ds^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left\{ \frac{4x^{*2}[-4x^{*2} + (i-j)^2 h^2]}{[4x^{*2} + (i-j)^2 h^2]^2} + \ln \left[1 + \frac{4x^{*2}}{(i-j)^2 h^2} \right] \right\}. \quad (7)$$

В выражении (7) параметр x изменяется в пределах от b до $d-b$. Найденная формула, очевидно, является приближенной. Корректность используемого приближения подробно обсуждалась в работе [7], согласно которой его точность удовлетворительна.

Изменение энергии $\Delta W(x, s)$ в общем случае характеризует зарождение и эволюцию ансамбля нановозмущений. В частном же случае, при $s = b$, формула (7) описывает классическое зарождение и скольжение решеточных частичных дислокаций. Т.е. анализ выражения (7) позволяет одновременно описывать как новый (через нановозмущения), так и классический (дислокационное скольжение) режимы деформации. Также не представляет труда провести сравнение с результатами работы [7], которые являются частным случаем (реализующимся при $N = 1$) предложенной в настоящей работе модели. Ниже мы провели такой анализ на примере нанопроволоки из золота (Au). Для Au типичны следующие значения параметров: $G = 27$ ГПа, $\nu = 0.44$, $\gamma_s = 1.48$ Дж/м², $b = 0.166$ нм [17]. Энергия $\gamma_{gsf}(s)$ обобщенного дефекта упаковки в Au была получена компьютерным моделированием [18] и может быть аппроксимирована следующим образом:

$$\gamma_{gsf}(s) = \begin{cases} \frac{\gamma_m}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi s}{b} \right), & 0 \leq s/b < 1/2, \\ \frac{\gamma_m + \gamma_0}{2} - \frac{\gamma_m - \gamma_0}{2} \cos \frac{2\pi s}{b}, & 1/2 \leq s/b < 1. \end{cases} \quad (8)$$

Здесь γ_m и γ_0 – максимальное и минимальное значения $\gamma_{gsf}(s)$, соответствующие нестабильному и стабильному состояниям обобщенного дефекта упаковки. Для Au эти величины равны: $\gamma_m \approx 0.09$ Дж/м², $\gamma_0 \approx 0.031$ Дж/м² [18].

Ниже мы рассчитали зависимости критического напряжения τ_c , при котором происходит переход к безбарьерному зарождению и росту нановозмущений, от различных параметров задачи. Так на Рис. 4 приведены зависимости $\tau_c(N)$, рассчитанные для значений $d = 5, 10$ и 20 нм (кривые 1, 2 и 3, соответственно) и $h = 5b$. Из этого рисунка следует, что, вообще говоря, зарождение одиночного нановозмущения выгоднее, чем зарождение ансамбля из $N > 1$ нановозмущений (Рис. 1), т.к. напряжение τ_c для $N = 1$ всегда ниже. Однако, нетрудно видеть, что разница весьма незначительна: если сравнивать случаи $N = 1$ и $N = 10$ (при котором зависимость $\tau_c(N)$ практически выходит на насыщение), то разница в соответствующих критических напряжениях $< 1\%$. Т.е. на практике следует ожидать, что коллективное зарождение нановозмущений (Рис. 1) фактически равноправно с зарождением одиночных возмущений (см. работу [7]). В реальной нанопроволоке при наличии отклонений от идеальной модельной конфигурации, используемой здесь для расчета, можно ожидать, что в определенных ситуациях (например, наличие ступенек в исходной недеформированной нанопроволоке, изменяющийся размер сечения по ее длине и т. п.) незначительное преимущество зарождения одиночного нановозмущения ($N = 1$) может нивелироваться в пользу коллективного зарождения (Рис. 1). С другой стороны, наше изначальное предположение, что коллективное зарождение нановозмущений может быть энергетически выгоднее одиночного за счет взаимного экранирования дислокационных полей напряжений не подтвердилось. Фактически дислокационное взаимодействие оказывает слабое влияние на процесс деформации нанопроволоки.

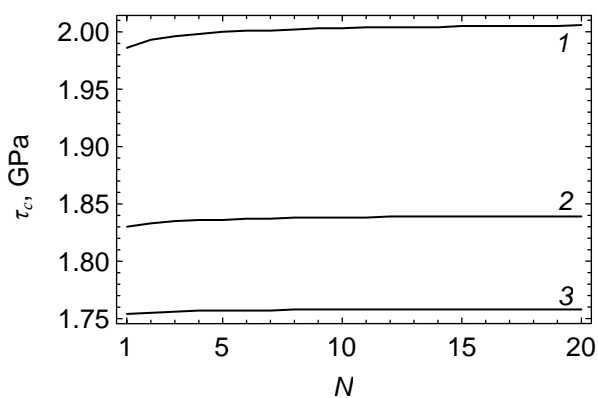


Рис. 4. Зависимости критического напряжения τ_c от количества нановозмущений N , рассчитанные для $h = 5b$ и $d = 5, 10, 20$ нм (кривые 1, 2, 3 соответственно).

Для полноты картины мы также рассчитали зависимости критического напряжения τ_c от периода h дислокационной структуры (Рис. 5) и размера d сечения нанопроволоки (Рис. 6). Зависимость $\tau_c(h)$, рассчитанная для $d = 5, 10$ и 20 нм (кривые 1, 2 и 3 соответственно на Рис. 5) и $N = 5$, иллюстрирует, по сути, тот же факт, что и зависимость $\tau_c(N)$ (Рис. 4), а именно: взаимодействие между дислокациями оказывает очень слабое влияние на τ_c . Зависимость же $\tau_c(d)$, рассчитанная для $h = 2b, 5b$ (кривые 1, 2 соответственно на Рис. 6) и $N = 5$, демонстрирует стандартную тенденцию к увеличению прочности нанопроволоки с уменьшением ее размера d .

Литература

- [1] M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, J.N. Florando, W.D. Nix // *Science* **305** (2004) 986.
 [2] J.R. Greer, W.D. Nix // *Phys. Rev. B* **73** (2006) 245410.
 [3] J.R. Greer // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **13** (2006) 59.
 [4] S. Brinckmann, Ju-Young Kim, J.R. Greer // *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 155502.
 [5] E. Rabkin, D.J. Srolovitz // *Nano Lett.* **7** (2007) 101.
 [6] T. Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall // *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 025502.
 [7] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 135501.
 [8] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Phys. Rev. B* **83** (2011) 054111.
 [9] M.Yu Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **54** (2006) 2489.
 [10] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 211901.
 [11] M.Yu Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **56** (2008) 1642.
 [12] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.J. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang // *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 045503.
 [13] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov, E. Kaxiras // *Phys. Rev. B* **62** (2000) 3099.
 [14] N. Bernstein, E.B. Tadmor // *Phys. Rev. B* **69** (2004) 094116.
 [15] T. Mura, In: *Advances in Material Research*, Vol. 3, ed. by H. Herman (Interscience, New York, 1968) pp. 1-108.
 [16] T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids*, (Dordrecht: Martinus Nijhoff Publishers, 1987).
 [17] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations*, (New York: Wiley, 1982).
 [18] H.S. Park, J.A. Zimmerman // *Phys. Rev. B* **72** (2005) 054106.

PLASTIC DEFORMATION IN NANOWIRES VIA COLLECTIVE FORMATION OF NANODISTURBANCES

S.V. Bobylev^{1,2*}, D.A. Druzhinin², I.A. Ovid'ko^{1,2}

¹Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,
Bolshoj 61, Vasil. Ostrov, St. Petersburg 199178, Russia

²Department of Mathematics and Mechanics, St. Petersburg State University
Universitetsky pr. 28, Stary Peterhof, St. Petersburg 198504, Russia

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

Abstract. A new physical mechanism of plastic deformation in nanowires is suggested and theoretically described. This mechanism represents collective formation of nanodisturbances – nanoscopic areas of plastic shear with tiny shear vectors – in deformed nanowires. We calculated the energy characteristics for collective nanodisturbance formation and compared them with those for conventional dislocation generation and our earlier model of similar mechanism. It is shown that the deformation mode via collective nanodisturbance nucleation can dominate in Au nanowires deformed at high stresses and zero temperature.

References

- [1] M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, J.N. Florando, W.D. Nix // *Science* **305** (2004) 986.

- [2] J.R. Greer, W.D. Nix // *Phys. Rev. B* **73** (2006) 245410.
- [3] J.R. Greer // *Rev. Adv. Mater. Sci.* **13** (2006) 59.
- [4] S. Brinckmann, Ju-Young Kim, J.R. Greer // *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 155502.
- [5] E. Rabkin, D.J. Srolovitz // *Nano Lett.* **7** (2007) 101.
- [6] T.Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall // *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 025502.
- [7] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 135501.
- [8] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko // *Phys. Rev. B* **83** (2011) 054111.
- [9] M.Yu Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **54** (2006) 2489.
- [10] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 211901.
- [11] M.Yu Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Acta Mater.* **56** (2008) 1642.
- [12] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.J. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang // *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 045503.
- [13] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov, E. Kaxiras // *Phys. Rev. B* **62** (2000) 3099.
- [14] N. Bernstein, E.B. Tadmor // *Phys. Rev. B* **69** (2004) 094116.
- [15] T. Mura, In: *Advances in Material Research*, Vol. 3, ed. by H. Herman (Interscience, New York, 1968) pp. 1-108.
- [16] T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids*, (Dordrecht: Martinus Nijhoff Publishers, 1987).
- [17] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations*, (New York: Wiley, 1982).
- [18] H.S. Park, J.A. Zimmerman // *Phys. Rev. B* **72** (2005) 054106.