

ФИЗИКА ПРОЧНОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ

PACSnumbers: 61.72.Bb, 62.20.F-, 62.20.mm, 62.23.Hj, 62.25.Mn, 81.07.Gf, 83.10.Rs

Влияние кристаллографической ориентации на закономерности размерного эффекта при растяжении нанопроволоки молибдена

С. А. Котречко, А. В. Овсянников, В. В. Лидич

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03142 Киев, Украина*

Методом молекулярной динамики установлены закономерности влияния диаметра нанопроволок Mo на их прочность для трёх кристаллографических ориентаций [100], [110] и [111] при двух температурах 77 и 300 К. Обнаружено существование размерного эффекта при диаметрах образцов, меньших 4 нм. Для цилиндрических нанобразцов ориентации [100] размерный эффект проявляется в увеличении прочности на 17% при уменьшении диаметра образца с 4 до 1 нм. В то же время при растяжении этих нанобразцов в направлениях [110] и [111] наблюдается аномальный размерный эффект, который проявляется в падении прочности до 14%. Показано, что причиной существования этих противоположных тенденций в проявлении размерного эффекта является образование в наноразмерном образце различных типов дефектов, а именно, неравновесных двойников при растяжении в направлении [100] и неравновесных дислокаций при растяжении в направлениях [110] и [111].

Ключевые слова: нанопроволоки ОЦК-металлов, прочность, размерный эффект, локальная нестабильность, поверхностное натяжение.

Методом молекулярної динаміки встановлено закономірності впливу

Corresponding author: Sergiy Oleksiyovych Kotrechko
E-mail: serkotr@gmail.com

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: S. O. Kotrechko, O. V. Ovsyannikov, and V. V. Lidych, Influence of Crystallographic Orientation on Regularities of Size Effect under a Tension of a Nanowire of Molybdenum, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 2: 183–199 (2018) (in Russian), DOI: 10.15407/mfint.40.02.0183.

діаметра нанодроту Мо на його міцність для трьох кристалографічних орієнтацій [100], [110] і [111] при двох температурах 77 і 300 К. Виявлено наявність розмірного ефекту при діаметрах зразків, менших за 4 нм. Для циліндричних нанозразків з орієнтацією [100] розмірний ефект проявляється у збільшенні міцності на 17% при зменшенні діаметра зразка з 4 до 1 нм. У той же час при розтягненні цих нанозразків у напрямках [110] і [111] спостерігається аномальний розмірний ефект, який проявляється у падінні міцності до 14%. Показано, що причиною наявності цих протилежних тенденцій у прояві розмірного ефекту є утворення в нанорозмірному зразку різних типів дефектів, а саме, нерівноважних двійників при розтязі в напрямку [100] і нерівноважних дислокацій при розтязі в напрямках [110] та [111].

Ключові слова: нанодроту ОЦК-металів, міцність, розмірний ефект, локальна нестабільність, поверхневий натяг.

The influence of diameter of the Mo single-crystal nanowires on their strength for the three crystallographic orientations [100], [110] and [111] at temperatures of 77 and 300 K is revealed by means of the use of molecular-dynamic simulations. The existence of size effect in samples with diameter less than 4 nm is discovered. For cylindrical nanospecimen with the [100] orientation, size effect consists in the increase of strength by 17% with sample diameter decreasing from 4 to 1 nm. At the same time, when these nanospecimens are stretched along the [110] and [111] directions, an anomalous size effect is observed that manifests itself in a strength decreasing up to 14%. As shown, the reason for existence of these opposite tendencies in the manifestation of size effect is formation of different types of defects in nanosize specimens, namely, non-equilibrium twins under tension along the [100] direction and non-equilibrium dislocations under tension along the [110] and [111] directions.

Key words: b.c.c. nanowires, strength, size effect, local instability, surface tension.

(Получено 8 декабря 2015 г.; окончат. вариант — 8 января 2018 г.)

1. ВСТУПЛЕНИЕ

Существенные достижения в получении и использовании наноразмерных объектов с контролируемыми размерами и свойствами являются характерной особенностью развития нанотехнологий в последнее десятилетие. Нанокристаллы являются типичным представителем этих наноразмерных объектов. На сегодняшний день известны многочисленные публикации по исследованию наностолбиков (nanopillars) ОЦК- и ГЦК-металлов с размерами поперечного сечения 50–500 нм, получаемых методами литографии или ионно-лучевой обработки [1–8], а также наноигл (nanoneedles) ОЦК-металлов [9, 10].

Результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования растяжения нанопроволок (nanowires) из ГЦК-металлов (Cu, Au, Ni, Ag) предсказывают существование размерного эффекта (size effect) в области диаметров образцов меньше 10–20 нм. В этом случае при растяжении в направлениях [100], [110], [111] наблюдается увеличение прочности при уменьшении размера поперечного сечения [11–15]. Обратный эффект был установлен в [16, 17] при моделировании растяжения призматических и цилиндрических нанопроволок ОЦК-металлов (Mo, Fe), ориентированных вдоль оси деформации [110]. Позже аналогичные результаты были получены в [20] для нанобразцов Mo с ориентацией [111]. В связи с этим возникает вопрос о природе размерного эффекта при растяжении нанобразцов и механизма влияния типа кристаллической решётки и ориентации нанокристалла на этот эффект.

Потеря устойчивости наноразмерных кристаллов в процессе их деформации связана с образованием дефектов кристаллического строения [19, 20]. Это требует рассмотрения закономерностей влияния ориентации кристалла и типа его решётки на вид дефектов, контролирующих уровень прочности этих кристаллов.

Цель работы заключается в том, чтобы на примере наноразмерных кристаллов молибдена установить влияние кристаллографической ориентации на закономерности проявления размерного эффекта и предложить модель этого эффекта.

2. МЕТОДИКА МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В качестве объекта моделирования использовались наноразмерные кристаллы молибдена в виде цилиндрических образцов (нанопроволоки). Ранее, в работе [16], было установлено, что, в отличие от ГЦК-кристаллов, уменьшение диаметра Mo приводит к уменьшению его прочности при растяжении в направлении [110]. В связи с этим моделировался процесс растяжения нанопроволоки в направлениях [100], [110], [111]. Диаметр нанопроволоки изменялся в интервале от 1 до 12,5 нм. Использовалось программное обеспечение XMD, а визуализация осуществлялась с помощью программы VMD. Программный пакет разработан в Центре моделирования материалов Коннектикутского университета и предоставляется в свободном доступе [21]. Моделирование растяжения проводилось для двух температур: 77 и 300 К.

Основываясь на результатах исследования влияния формы поперечного сечения нанопроволоки на прочность [15], во избежание образования дополнительных концентраторов напряжений использовались образцы цилиндрической формы, а именно, моделировались цилиндрические (с точностью до кристаллографи-

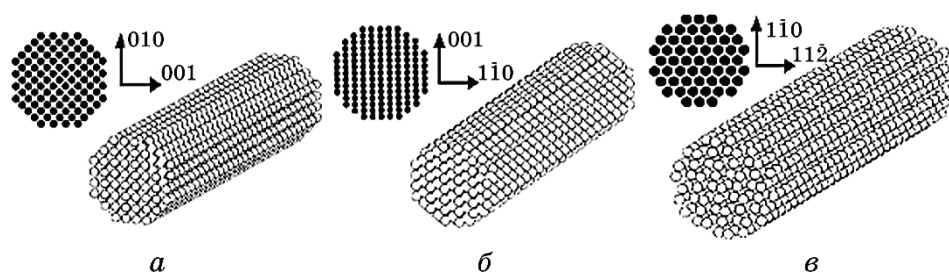


Рис. 1. Исходная форма цилиндрических нанопроволок Mo ($d = 2,5$ нм) и их поперечных сечений с кристаллографической огранкой для моделирования растяжения в направлениях: $[100]$ (а), $[110]$ (б), $[111]$ (в).

Fig. 1. Original shape of cylindrical Mo nanowires ($d = 2.5$ nm) and their cross-sections with the crystallographic faceting for tension modelling along directions: $[100]$ (a), $[110]$ (b), $[111]$ (c).

ческой огранки) образцы. На рисунке 1 представлены поперечные сечения и сами нанообразцы, которые использовались в процессе моделирования с соответствующими кристаллографическими ориентациями. Длина цилиндрического нанообразца задавалась при соотношении длины к диаметру равном 4:1. При этом придерживались соотношения длины рабочей части к диаметру равного 3:1. В свою очередь, чтобы обосновать выбор рабочей длины нанообразцов, было проведено моделирование растяжения нанопроволок Mo с тремя ориентациями для постоянных диаметра (2,1 нм) и температуры (77 К) при разных длинах рабочей области. По результатам моделирования установлено, что в диапазоне длин 4,5–13 нм наноразмерных проволок Mo эффект изменения прочности не обнаруживается.

В данной работе был применён метод погруженного атома с использованием апробированного [22] потенциала для Mo. Скорости тепловых колебаний атомов задавались случайным образом по закону Больцмана. С целью определения величины статистического разброса прочности исследовалось влияние на её величину вариации распределения начальных скоростей атомов. По результатам моделирования растяжения на 10 образцах с разным распределением начальных значений скоростей атомов определялась величина статистического разброса прочности. Её значение не превышало 2%. Столь малое значение разброса механических свойств обусловлено достаточно большим количеством атомов в наноразмерном образце (более 1000 атомов) и отсутствием ударных волн при нагружении.

Система атомов поддавалась релаксации при постоянной температуре в течение 10^{-10} с, после чего задавались перемещения торцевых частей нанообразца (захватов). Центральная часть ци-

линдра, длина которой составляет три диаметра, оставалась свободной. Атомы, принадлежащие пограничным торцевым слоям, «замораживались» и не принимали участия в тепловом движении. В процессе моделирования одноосного растяжения нанопроволок Мо использовалась постоянная скорость перемещения захватов, которая равнялась 20 м/с. Соответственно, скорость деформации кристалла составляла $(0,5-1,6) \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$.

Рассчитывались значения глобальных (средних по объёму образца) и локальных (действующих в объёме, приходящемся на один атом) напряжений, а также значения локальных напряжений, действующих в системах, где наблюдается сдвиговая неустойчивость. Эти напряжения рассчитывались, как в процессе растяжения, так и для ненагруженных нанообразцов. Для ненагруженных нанопроволок были проведены расчёты напряжений, действующих на атомы в соответствующих системах скольжения $\langle 211 \rangle \{-111\}$, $\langle 11-2 \rangle \{111\}$ и $\langle 121 \rangle \{1-11\}$.

Значение локальных напряжений определялось как:

$$\xi_{ij}^k = -\frac{1}{2\Omega^k} \sum_{m \neq k}^n [\mathbf{f}_i^{km} \times \mathbf{r}_i^{km}], \quad (1)$$

где i и j — индексы тензора напряжений, k — рассматриваемый атом, Ω^k — объём, приходящийся на один атом, m — ближайший атом, n — число взаимодействующих ближайших атомов, \mathbf{f}_i^{km} — вектор силы взаимодействия между атомами m и k , \mathbf{r}_i^{km} — радиус-вектор расстояния между этими атомами.

Средние по объёму образца механические напряжения рассчитывались по формуле:

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \xi_{ij}^k, \quad (2)$$

где N — количество атомов в образце.

Для расчёта локальных касательных напряжений в заданных системах скольжения использовалось следующее выражение:

$$\xi_{ns} = \sum_{i,j} \xi_{ij} n_i s_j, \quad (3)$$

где \mathbf{s} — направление сдвига, \mathbf{n} — нормаль к площадке, где реализуется сдвиг.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ АНАЛИЗ

По результатам компьютерного моделирования были построены

зависимости «напряжение–деформация», которые позволяют определить механические характеристики нанопроволок (рис. 2).

Согласно полученным данным, на эти характеристики существенное влияние оказывает кристаллографическая ориентация нанобразца. Так, максимальные значения прочности σ_y достигаются при растяжении в направлении [111], а минимальные —

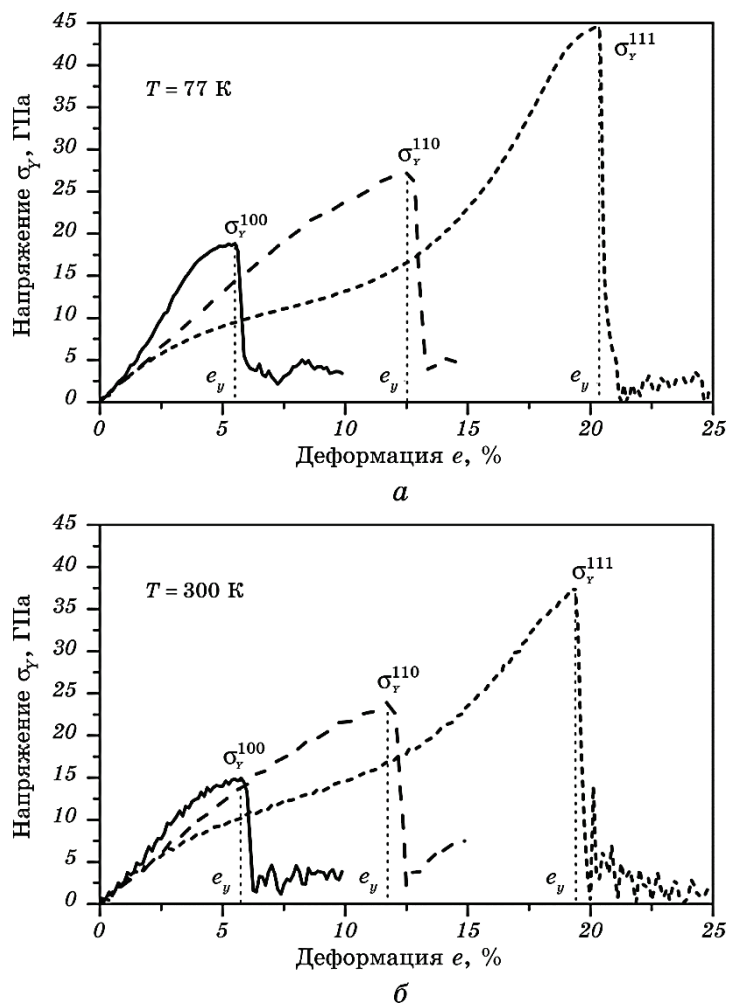


Рис. 2. Зависимости «напряжение–деформация» для нанопроволок Mo диаметром 2,5 нм при одноосном растяжении в направлениях [100], [110], [111] при температурах 77 К (а) и 300 К (б).

Fig. 2. Stress–strain dependences for Mo nanowires with diameter of 2.5 nm under uniaxial tension along [100], [110], [111] directions at the temperatures of 77 K (a) and 300 K (b).

в направлении [100].

Максимум на зависимостях «напряжение–деформация» соответствует напряжению образования неустойчивого дефекта, распространение которого в объёме образца приводит к резкому уменьшению сопротивления деформированию образца.

В работах [16, 17, 23] было показано, что потеря стабильности цилиндрических нанообразцов из Mo и Fe при их растяжении в направлении [100] сопровождается образованием и ростом двойника, а переход от упругих к пластическим деформациям при растяжении в кристаллографических направлениях [110] и [111] инициируется образованием неустойчивых дислокаций.

По данным графиков «напряжение–деформация» для всего диапазона диаметров ($d = 1,0–12,5$ нм) были определены критические значения глобальных напряжений σ_Y . На основе полученных данных построены зависимости прочности нанопроволок Mo от их диаметра при температурах деформации 77 и 300 К (рис. 3).

Как следует из полученных зависимостей, при диаметрах нанообразцов, превышающих 4 нм, прочность остаётся практически неизменной. Однако при меньших диаметрах прочность падает приблизительно на 14% для образцов с ориентациями [110] и [111], а для образцов, ориентированных в направлении [100], прочность, наоборот, увеличивается на 17%.

Увеличение температуры от 77 до 300 К приводит к некоторому уменьшению абсолютных значений прочности, однако характер зависимости прочности от диаметра образца остаётся неизменным.

На сегодняшний день имеются данные МД-моделирования влияния размеров поперечного сечения на прочность нанопроволок квадратного поперечного сечения из ГЦК-металлов [11–15, 24, 25]. Согласно этим данным для нанопроволок из ГЦК-металлов (Cu, Ni, Au, Ag) при размерах поперечного сечения, меньших 4,0 нм, имеет место повышение на 10–20% уровня их прочности при уменьшении размера поперечного сечения. Необходимо подчеркнуть, что этот эффект наблюдается для всех трёх ориентаций [100], [110] и [111], т.е. для ориентаций [110] и [111] эффекты для ГЦК- и ОЦК-металлов — противоположные.

Особенности напряжённо-деформированного состояния наноразмерных проволок в значительной степени определяются действием сил поверхностного натяжения. Как результат, действие этих напряжений должно оказывать влияние на уровень прочности нанообразцов. В связи с этим в работе определялись значения касательных напряжений, создаваемых силами поверхностного натяжения.

На рисунке 4 приведены эпюры распределения в поперечном сечении нанопроволоки Mo локальных касательных напряжений

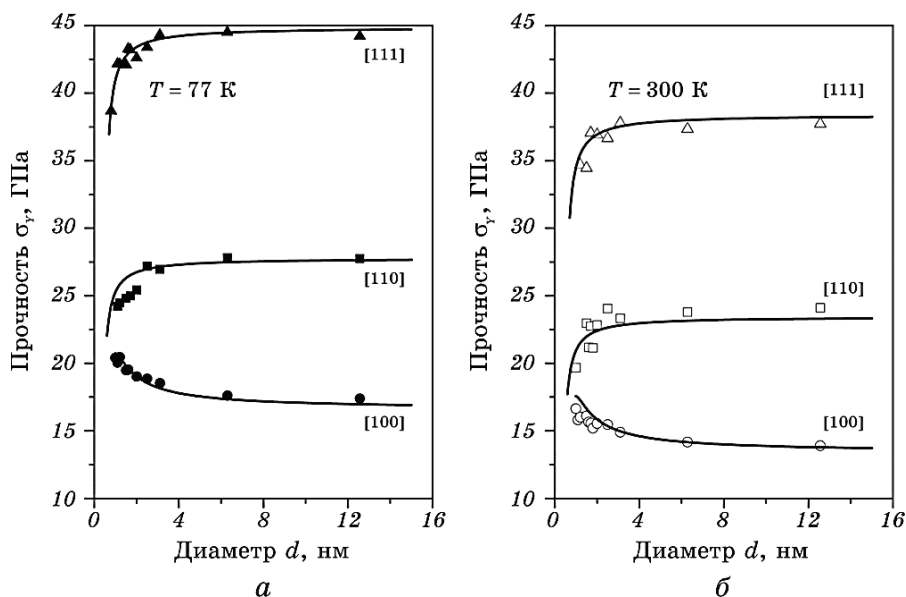


Рис. 3. Зависимость прочности образца нанопроволок Мо от их диаметра в условиях одноосного растяжения в направлениях [100], [110], [111] при $T = 77$ К (а) и $T = 300$ К (б); линии — расчёт по (8) (при соответствующих значениях параметров), маркёры — результаты МД-моделирования: [110] ($f_{xx} = 1,777$ Н/м [27], $h = 0,29$ нм, $m = 0,470$, $\tau_c = 15,9$ ГПа ($T = 77$ К), $\tau_c = 13,9$ ГПа ($T = 300$ К) [28], $\alpha = 1$); [111] ($f_{xx} = 2,345$ Н/м [27], $h = 0,40$ нм, $m = 0,314$, $\tau_c = 15,9$ ГПа ($T = 77$ К), $\tau_c = 13,9$ ГПа ($T = 300$ К) [28], $\alpha = 1$); [100] ($f_{xx} = 2,070$ Н/м [27], $h = 0,10$ нм, $h^* = 0,40$ нм, $m = 0,47$, $\tau_c = 9,7$ ГПа ($T = 77$ К), $\tau_c = 8,3$ ГПа ($T = 300$ К) [28], $\alpha = 1$).

Fig. 3. Dependence of strength of the Mo nanowires on their diameter at $T = 77$ K (a) and $T = 300$ K (b) for three crystallographic orientations; solid lines correspond to calculations by (8) for the following orientations (with corresponding values of parameters); symbols present the results of MD-simulation: [110] ($f_{xx} = 1.777$ N/m [27], $h = 0.29$ nm, $m = 0.470$, $\tau_c = 15.9$ GPa ($T = 77$ K), $\tau_c = 13.9$ GPa ($T = 300$ K) [28], $\alpha = 1$); [111] ($f_{xx} = 2.345$ N/m [27], $h = 0.40$ nm, $m = 0.314$, $\tau_c = 15.9$ GPa ($T = 77$ K), $\tau_c = 13.9$ GPa ($T = 300$ K) [28], $\alpha = 1$); [100] ($f_{xx} = 2.070$ N/m [27], $h = 0.10$ nm, $h^* = 0.40$ nm, $m = 0.47$, $\tau_c = 9.7$ GPa ($T = 77$ K), $\tau_c = 8.3$ GPa ($T = 300$ K) [28], $\alpha = 1$).

ξ_{ns} , действующих в системах скольжения $\langle 211 \rangle \{-111\}$, $\langle 11-2 \rangle \{111\}$ и $\langle 121 \rangle \{1-11\}$. Эти эпюры приведены для трёх исследованных ориентаций [100], [110] и [111]. Для каждой ориентации локальные касательные напряжения определялись в нескольких соседних атомных слоях.

Согласно приведённым данным, действие сил поверхностного натяжения приводит к существенно неоднородному распределению касательных напряжений.

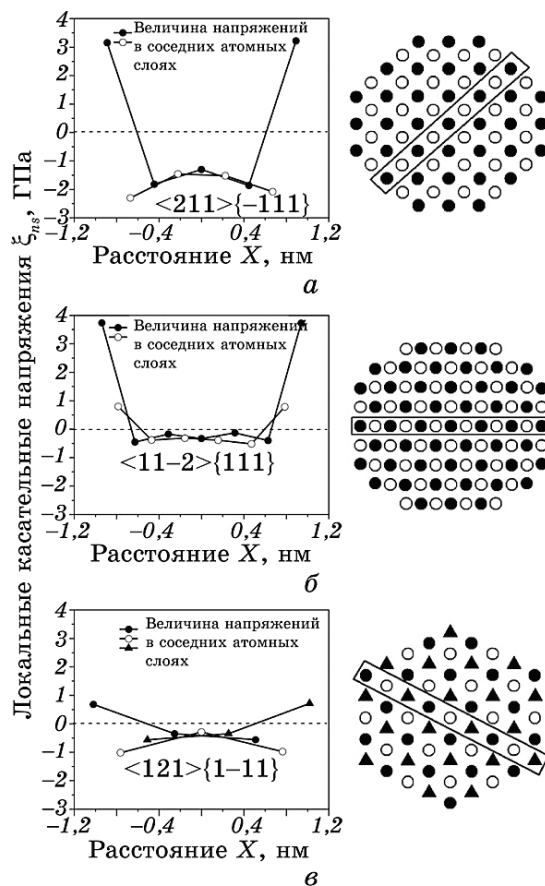


Рис. 4. Распределение локальных касательных напряжений в системах скольжения $\langle 211 \rangle \{-111\}$, $\langle 1-21 \rangle \{111\}$ и $\langle 121 \rangle \{1-11\}$ нанопроволок Mo $[100]$ (а), $[110]$ (б) и $[111]$ (в) в ненагруженном состоянии при $T = 0$ К. Диаметр поперечного сечения 2,1 нм; •, ▲ и ○ — отвечают значениям напряжений в соседних слоях атомов.

Fig. 4. Local shear stress distribution in $\langle 211 \rangle \{-111\}$, $\langle 1-21 \rangle \{111\}$ and $\langle 121 \rangle \{1-11\}$ glide systems of nanoscale Mo wires $[100]$ (а), $[110]$ (б) and $[111]$ (в) for unloaded state at $T = 0$ K. The cross-section diameter is 2.1 nm; •, ▲ and ○ correspond to stress values in the neighbouring atomic layers.

При этом величина касательных напряжений, создаваемых силами поверхностного натяжения, может достигать достаточно больших значений. Так, например, величина этих напряжений в нанобразцах с ориентацией $[110]$ достигает 4 ГПа, что составляет 24% от значения критического напряжения σ_Y потери устойчивости на сдвиг.

Значения локальных касательных напряжений в поверхностном слое и в центральной части нанопроволоки зависят от кристаллографической ориентации образца. Максимальное значение касательных напряжений ξ_{ns} в поверхностном слое достигается в образцах нанопроволоки с ориентацией [110], а в центральной части — у нанобразцов, ориентированных вдоль [100]. Мини-

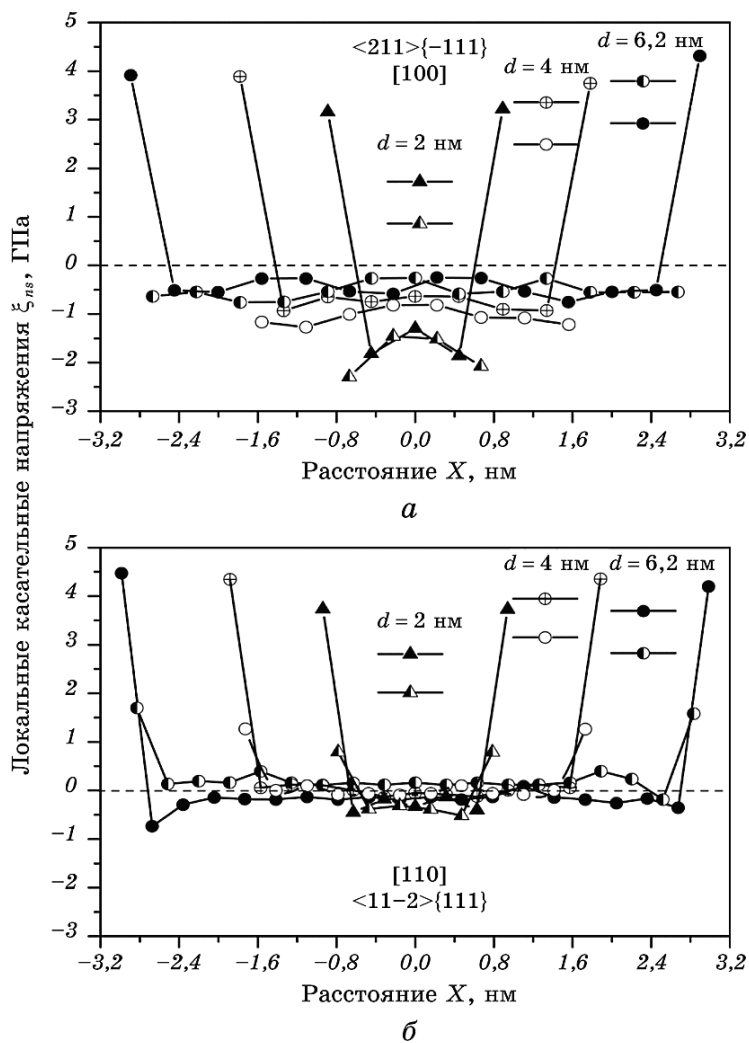


Рис. 5. Влияние диаметра и ориентации нанопроволоки Mo на распределение локальных касательных напряжений в ненагруженном состоянии при $T = 0$ К.

Fig. 5. Influence of the both diameter and orientation of the nanowire Mo on the distribution of local shear stresses. Unloaded state at $T = 0$ K.

мальные значения этих напряжений наблюдаются для ориентации [111].

Как следует из данных, приведённых на рис. 5, изменение диаметра нанопроволоки оказывает влияние на распределение локальных напряжений. Особенно наглядно это проявляется на нанопроволоке с ориентацией [100].

Как отмечалось выше, прочность нанопроволок из ГЦК-металлов увеличивается при уменьшении их диаметра для всех трёх рассматриваемых ориентаций. Авторы работ [11–15, 24] связывают этот эффект с увеличением уровня сжимающих напряжений в центральной части нанобразца при уменьшении их поперечного размера. Согласно этому подходу, обусловленные действием сил поверхностного натяжения сжимающие напряжения вычитаются из приложенных, увеличивая тем самым необходимый для потери устойчивости образца уровень приложенных напряжений. В этом случае с уменьшением диаметра уровень прочности нанобразца должен увеличиваться, что согласуется с данными МД-моделирования для ГЦК-металлов для трёх кристаллографических направлений [100], [110] и [111]. Однако такая упрощённая механистическая трактовка размерного эффекта не позволяет объяснить обратную тенденцию в изменении прочности при растяжении в направлении [110] нанопроволоки из ОЦК-металла, которая впервые была обнаружена в работе [16], а затем подтверждена в [17].

4. МОДЕЛЬ РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА

При построении модели размерного эффекта необходимо учесть три принципиальные особенности механизма потери стабильности наноразмерных проволок, а именно: (i) потеря стабильности кристаллической решётки является сдвиговой по своей физической природе, поэтому результатом этой нестабильности является образование дислокаций или двойников [23]; (ii) при растяжении потеря стабильности кристаллической решётки генерируется в поверхностном слое образца, где действуют максимальные касательные напряжения; (iii) переход от упругих к пластическим деформациям связан с потерей стабильности нанопроволоки в локальной области критического размера, достаточной для образования неравновесной дислокации или двойника в образце. При этом необходимо учесть, что распределение локальных напряжений в поперечном сечении нанобразца является существенно неоднородным (переход от растягивающих напряжений к сжимающим происходит на расстоянии, соизмеримом с несколькими межатомными расстояниями). В такой ситуации условие реализации локальной нестабильности может быть описано как дости-

жение критического уровня эффективных однородных напряжений, действующих в пределах поверхностного слоя эффективной толщины h_1 . В этом случае h_1 следует рассматривать как константу материала, абсолютная величина которой соизмерима с межатомным расстоянием.

Исходя из условия равновесия ненагруженного цилиндрического нанобразца, можно получить выражение для эффективных растягивающих однородно распределённых напряжений σ_{xx}^{sf} , действующих в поверхностном слое глубиной h_1 :

$$\sigma_{xx}^{\text{sf}} = \frac{f_{xx}d}{h_1(d - h_1)}, \quad (4)$$

где f_{xx} — сила поверхностного натяжения, действующая вдоль оси нанобразца, d — диаметр образца.

Соответственно, выражение для сжимающих напряжений σ_{xx}^{vol} в центральной части нанобразца имеет вид:

$$\sigma_{xx}^{\text{vol}} = -\frac{4f_{xx}d}{(d - 2h_1)^2}. \quad (5)$$

Проведённый в работе [24] анализ атомных перестроек, которые приводят к потере стабильности нанобразцов Мо и Fe, показал, что нестабильность нанокристаллов ОЦК-металлов обусловлена образованием неустойчивых дислокаций при растяжении в направлениях [110] и [111] и двойников при растяжении в направлении [100]. В первом случае дислокации образуются в растянутом поверхностном слое толщиной порядка длины вектора Бюргерса. В этом слое действуют растягивающие поверхностные напряжения, которые облегчают образование неустойчивой дислокации. Согласно (4) с уменьшением диаметра нанопроволоки уровень этих напряжений растёт, что должно приводить к уменьшению напряжения потери стабильности нанобразца, т.е. его прочности (рис. 3). Выражение для критического напряжения потери стабильности нанобразца этой ориентации имеет вид:

$$\sigma_Y = (\tau_c - t\sqrt{D})/m, \quad (6)$$

где τ_c — значение критического касательного напряжения образования дислокации, m — ориентационный фактор, $t\sqrt{D}$ — флуктуационная составляющая локальных касательных напряжений, которая характеризует влияние температуры на величину критического напряжения сдвиговой неустойчивости (t — константа, D — величина дисперсии локальных касательных напряжений, обусловленная тепловыми колебаниями атомов) [26], α_1 — коэффициент, который учитывает влияние многоосно-

го локального напряжённого состояния на величину локальных касательных напряжений.

С учётом (4) выражение для прочности σ_Y можно представить следующим образом:

$$\sigma_Y = \frac{1}{\alpha_1 m} (\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{\alpha_1 f_{xx} d}{h_1 (d - h_1)}. \quad (7)$$

Как показано на рисунке 3, эта зависимость хорошо согласуется с результатами молекулярно-динамического моделирования растяжения нанопроволоки в направлениях [110] и [111].

Несколько иная ситуация наблюдается при образовании дефекта упаковки при растяжении нанопроволок ГЦК-металлов в направлениях [100], [110], [111], или двойника при растяжении нанопроволок ОЦК-металлов в направлении [100]. В этом случае глубина области, где образуется дефект, превышает толщину растянутого слоя и попадает в область, где действуют сжимающие напряжения (рис. 6). Это приводит к тому, что в плоскости обра-

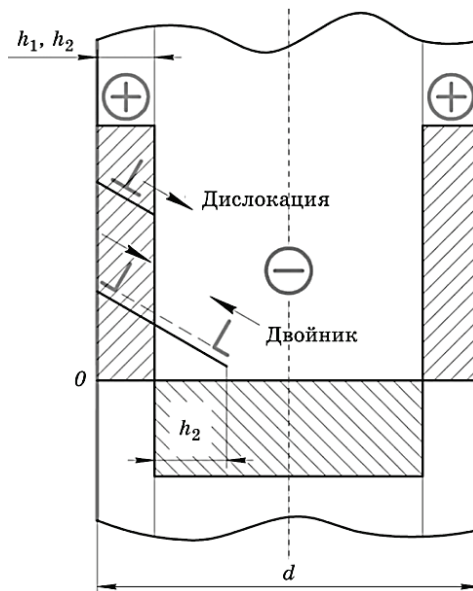


Рис. 6. Схема образования дефектов и распределения напряжений по объёму нанобразца, которые образуются в результате действия сил поверхностного натяжения: «+», «-» — растягивающие и сжимающие напряжения.

Fig. 6. Scheme of defects formation and stress distribution over the nanospecimen volume that are formed as a result of surface tension: '+', '-' are tensile and compressive stresses.

зования дефекта направление действия касательных напряжений изменяется на противоположное, что приводит к уменьшению результирующих касательных напряжений, действующих в момент образования дефекта. В результате этого, уровень приложенных напряжений, необходимых для потери стабильности нанобразца, т.е. его прочность, увеличивается, что наблюдается при растяжении M_0 в направлении [100] (рис. 3).

В этом случае верхняя оценка для величины прочности нанопроволоки имеет вид:

$$\sigma_Y = \frac{1}{m}(\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{f_{xx}d}{1+\beta} \left[\frac{\alpha_1}{h_1(d-h_1)} - \frac{4\alpha_2\beta}{(d-2h_2)^2} \right], \quad (8)$$

где

$$\beta = \frac{h_2}{h_1} \left[1 - \frac{h_1 + h_2}{d - h_1} \right], \quad (9)$$

h_2 — толщина слоя, в пределах которого на дефект действует противоположно направленное касательное напряжение (рис. 6), α_2 — аналог коэффициента α_1 для второго случая, β — характеризует соотношение площадей плоскости скольжения, попадающих в область действия сжимающих и растягивающих напряжений.

В выражении (8) второй член в квадратных скобках описывает уменьшение величины касательных напряжений в результате действия сжимающих напряжений во внутреннем слое (рис. 6).

Как следует из данных на рис. 3, зависимость (8) с достаточной точностью описывает закономерности увеличения прочности нанопроволоки M_0 в направлении [100] с уменьшением её диаметра.

Согласно (4), в предельном случае $d \gg h_1$ величина растягивающих напряжений в поверхностном слое стремится к постоянному значению:

$$\sigma_{xx}^{sf} = f_{xx} / h_1. \quad (10)$$

Следовательно, σ_Y для ориентаций [110] и [111] перестаёт быть зависимым от диаметра нанобразца, т.е. размерный эффект должен исчезать. Согласно (7), в этом случае:

$$\sigma_Y = \frac{1}{m}(\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{f_{xx}}{h_1}. \quad (11)$$

Это хорошо согласуется с данными, приведёнными на рис. 3.

Для ориентации [100] в этом случае σ_y имеет вид:

$$\sigma_Y \approx \frac{1}{m}(\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{f_{xx}}{1+\beta} \left[\frac{\alpha_1}{h_1} - \frac{4\alpha_2\beta}{d} \right]. \quad (12)$$

Согласно (12), для данной ориентации величина σ_Y должна зависеть от d , однако, поскольку $d \gg h_1$, влияние на σ_Y второго члена в квадратных скобках должно быть незначительным, т.е. должна наблюдаться тенденция к «насыщению» (рис. 3).

5. ВЫВОДЫ

1. Влияние диаметра (поперечного размера) нанопроволоки на величину касательных напряжений, индуцируемых силами поверхностного натяжения, является причиной размерного эффекта для прочности нанопроволок.

2. В отличие от нанопроволок ГЦК-металлов ориентаций [100], [110], [111] и ОЦК-металлов ориентации [100] при растяжении нанопроволоки Мо и других ОЦК-металлов в направлениях [110] и [111] наблюдается аномальный размерный эффект, который заключается в уменьшении прочности при уменьшении диаметра нанопроволоки.

3. Причиной этой аномалии являются разные типы дефектов, образование которых приводит к потере стабильности нанопроволоки. При растяжении нанопроволоки ОЦК-металлов в направлениях [110], [111] локальная нестабильность связана с образованием неустойчивых дислокаций в тонком поверхностном слое, где действие сил поверхностного натяжения приводит к увеличению уровня локальных касательных напряжений, т.е. способствует реализации локальной нестабильности. При растяжении в направлении [100], прочность нанопроволоки контролируется напряжением образования двойника. В этом случае, глубина слоя, необходимого для образования неустойчивого двойника, превышает толщину растянутого поверхностного слоя. Это снижает результирующую величину действующих локальных касательных напряжений в области, где образуется двойник, и приводит к увеличению прочности нанопроволоки.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. J. R. Greer, C. R. Weinberger, and W. Cai, *Mater. Sci. Eng. A*, **493**, Iss. 1–2: 21 (2008).
2. S. Brinckmann, J. Kim, and J. R. Greer, *Phys. Rev. Lett.*, **100**: 155502 (2008).
3. H. Bei, S. Shim, G. M. Pharr, and E. P. George, *Acta Mater.*, **56**: 4762 (2008).

4. J. Kim and J. R. Greer, *Appl. Phys. Lett.*, **93**: 101916 (2008).
5. M. D. Uchic, D. M. Dimiduk, J. N. Florando, and W. D. Nix, *Science*, **305**: 986 (2004).
6. J. R. Greer, W. C. Oliver, and W. D. Nix, *Acta Mater.*, **53**: 1821 (2005).
7. A. Rinaldi, P. Peralta, C. Friesen, and K. Sieradzki, *Acta Mater.*, **56**: 511 (2008).
8. J. Kim, D. Jang, and J. R. Greer, *Int. J. Plast.*, **28**: 46 (2012).
9. A. P. Shpak, S. O. Kotrechko, T. I. Mazilova, and I. M. Mikhailovskij, *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **10**: 045004 (2009).
10. T. I. Mazilova, V. A. Ksenofontov, V. N. Voyevodin, E. V. Sadanov, and I. M. Mikhailovskij, *Philos. Mag. Lett.*, **91**, No. 4: 304 (2011).
11. Z. Yang, Z. Lu, and Y. Zhao, *Comp. Mater. Sci.*, **46**: 142 (2009).
12. K. Gall, J. Diao, and M. L. Dunn, *Nano Lett.*, **4**, No. 12: 2431 (2004).
13. H. A. Wu, *Mech. Res. Commun.*, **33**: 9 (2006).
14. W. Lianga, D. J. Srolovitz, and M. Zhoua, *J. Mech. Phys. Solids*, **55**, Iss. 8: 1729 (2007).
15. A. M. Leach, M. McDowell, and K. Gall, *Adv. Funct. Mater.*, **17**: 43 (2007).
16. С. О. Котречко, О. В. Овсянников, В. В. Лідич, *Металлофиз. новейшие технол.*, **34**, № 11: 1517 (2012).
17. G. Sainath and B. K. Choudhary, *Comput. Mater. Sci.*, **111**: 406 (2016).
18. S. O. Kotrechko, A. N. Timoshevskij, S. O. Yablonovskii, I. M. Mikhailovskij, T. I. Mazilova, and V. V. Lidych, *Procedia Mater. Sci.*, No. 3: 391 (2014).
19. Ю. Г. Гордієнко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 9: 1217 (2011).
20. О. С. Гаценко, О. Е. Засимчук, П. О. Теселько, С. Г. Стіренко, Ю. Г. Гордієнко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 9: 1207 (2014).
21. M. P. Allen and T. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon Press: 1991).
22. M. W. Finnis and J. E. Sinclair, *Philos. Mag. A*, **50**, No. 45: 45 (1984).
23. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, *Предельная прочность* (Киев: Наукова думка: 2009).
24. J. K. Diao, K. Gall, M. L. Dunn, and J. A. Zimmerman, *Acta Mater.*, **54**: 643 (2006).
25. H. S. Park and P. A. Klein, *Phys. Rev. B*, **75**: 085408 (2007).
26. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, А. В. Овсянников, *Деформация и разрушение материалов*, № 11: 2 (2009).
27. P. Wang, W. Chou, A. Nie, Y. Huang, H. Yao, and H. Wang, *J. Appl. Phys.*, **110**: 093521 (2011).
28. А. П. Шпак, С. А. Котречко, А. В. Филатов, А. В. Овсянников, *Деформация и разрушение материалов*, № 11: 13 (2006).

REFERENCES

1. J. R. Greer, C. R. Weinberger, and W. Cai, *Mater. Sci. Eng. A*, **493**, Iss. 1–2: 21 (2008).
2. S. Brinckmann, J. Kim, and J. R. Greer, *Phys. Rev. Lett.*, **100**: 155502 (2008).
3. H. Bei, S. Shim, G. M. Pharr, and E. P. George, *Acta Mater.*, **56**: 4762

- (2008).
4. J. Kim and J. R. Greer, *Appl. Phys. Lett.*, **93**: 101916 (2008).
 5. M. D. Uchic, D. M. Dimiduk, J. N. Florando, and W. D. Nix, *Science*, **305**: 986 (2004).
 6. J. R. Greer, W. C. Oliver, and W. D. Nix, *Acta Mater.*, **53**: 1821 (2005).
 7. A. Rinaldi, P. Peralta, C. Friesen, and K. Sieradzki, *Acta Mater.*, **56**: 511 (2008).
 8. J. Kim, D. Jang, and J. R. Greer, *Int. J. Plast.*, **28**: 46 (2012).
 9. A. P. Shpak, S. O. Kotrechko, T. I. Mazilova, and I. M. Mikhailovskij, *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **10**: 045004 (2009).
 10. T. I. Mazilova, V. A. Ksenofontov, V. N. Voyevodin, E. V. Sadanov, and I. M. Mikhailovskij, *Philos. Mag. Lett.*, **91**, No. 4: 304 (2011).
 11. Z. Yang, Z. Lu, and Y. Zhao, *Comp. Mater. Sci.*, **46**: 142 (2009).
 12. K. Gall, J. Diao, and M. L. Dunn, *Nano Lett.*, **4**, No. 12: 2431 (2004).
 13. H. A. Wu, *Mech. Res. Commun.*, **33**: 9 (2006).
 14. W. Lianga, D. J. Srolovitz, and M. Zhoua, *J. Mech. Phys. Solids*, **55**, Iss. 8: 1729 (2007).
 15. A. M. Leach, M. McDowell, and K. Gall, *Adv. Funct. Mater.*, **17**: 43 (2007).
 16. S. O. Kotrechko, O. V. Ovsjannikov, and V. V. Lidych, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **34**, No. 11: 1517 (2012) (in Ukrainian).
 17. G. Sainath and B. K. Choudhary, *Comput. Mater. Sci.*, **111**: 406 (2016).
 18. S. O. Kotrechko, A. N. Timoshevskij, S. O. Yablonovskii, I. M. Mikhailovskij, T. I. Mazilova, and V. V. Lidych, *Procedia Mater. Sci.*, No. 3: 391 (2014).
 19. Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 9: 1217 (2011) (in Ukrainian).
 20. O. S. Gatsenko, O. E. Zasyrchuk, P. O. Tesel'ko, S. G. Stirenko, and Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 9: 1207 (2014) (in Ukrainian).
 21. M. P. Allen and T. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon Press: 1991).
 22. M. W. Finnis and J. E. Sinclair, *Philos. Mag. A*, **50**, No. 45: 45 (1984).
 23. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Predel'naya Prochnost'* [Ultimate Strength] (Kyiv: Naukova Dumka: 2009) (in Russian).
 24. J. K. Diao, K. Gall, M. L. Dunn, and J. A. Zimmerman, *Acta Mater.*, **54**: 643 (2006).
 25. H. S. Park and P. A. Klein, *Phys. Rev. B*, **75**: 085408 (2007).
 26. S. A. Kotrechko, Yu. Ya. Meshkov, and A. V. Ovsyannikov, *Deformatsiya i Razrushenie Materialov*, No. 11: 2 (2009) (in Russian).
 27. P. Wang, W. Chou, A. Nie, Y. Huang, H. Yao, and H. Wang, *J. Appl. Phys.*, **110**: 093521 (2011).
 28. A. P. Shpak, S. A. Kotrechko, A. V. Filatov, and A. V. Ovsyannikov, *Deformatsiya i Razrushenie Materialov*, No. 11: 13 (2006) (in Russian).