



ПРЕДПРИЯТИЕ ГОСКОРПОРАЦИИ "РОСАТОМ"

ФГУП "ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ АВТОМАТИКИ им. Н.Л.Духова"

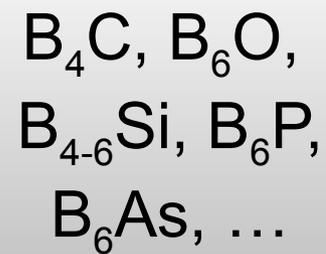
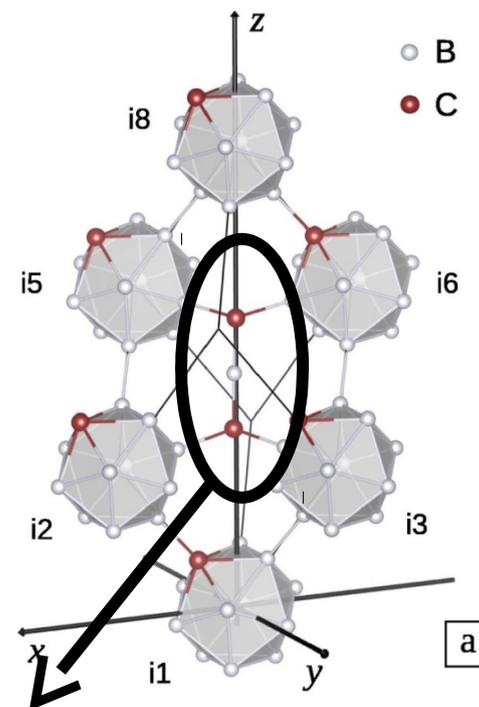
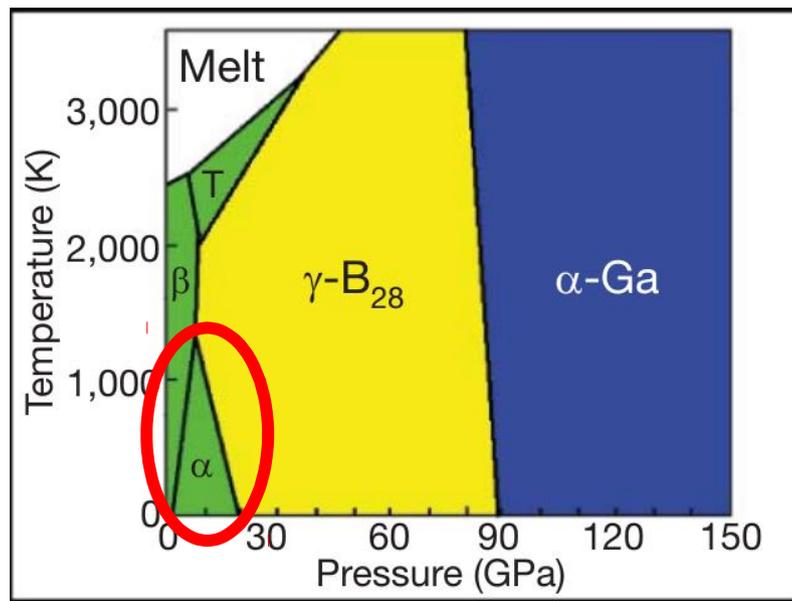
ЦЕНТР ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

# **Аморфизация в $\alpha$ -боре: Молекулярно динамическое исследование**

П.А. Покаташкин

# α-бор

- ❑ Стабильность при н.у.
- ❑ “Простая” аллотропная форма
- ❑ Схожая структура в боридных керамиках



# Общие сведения

Бор (карбид бора):

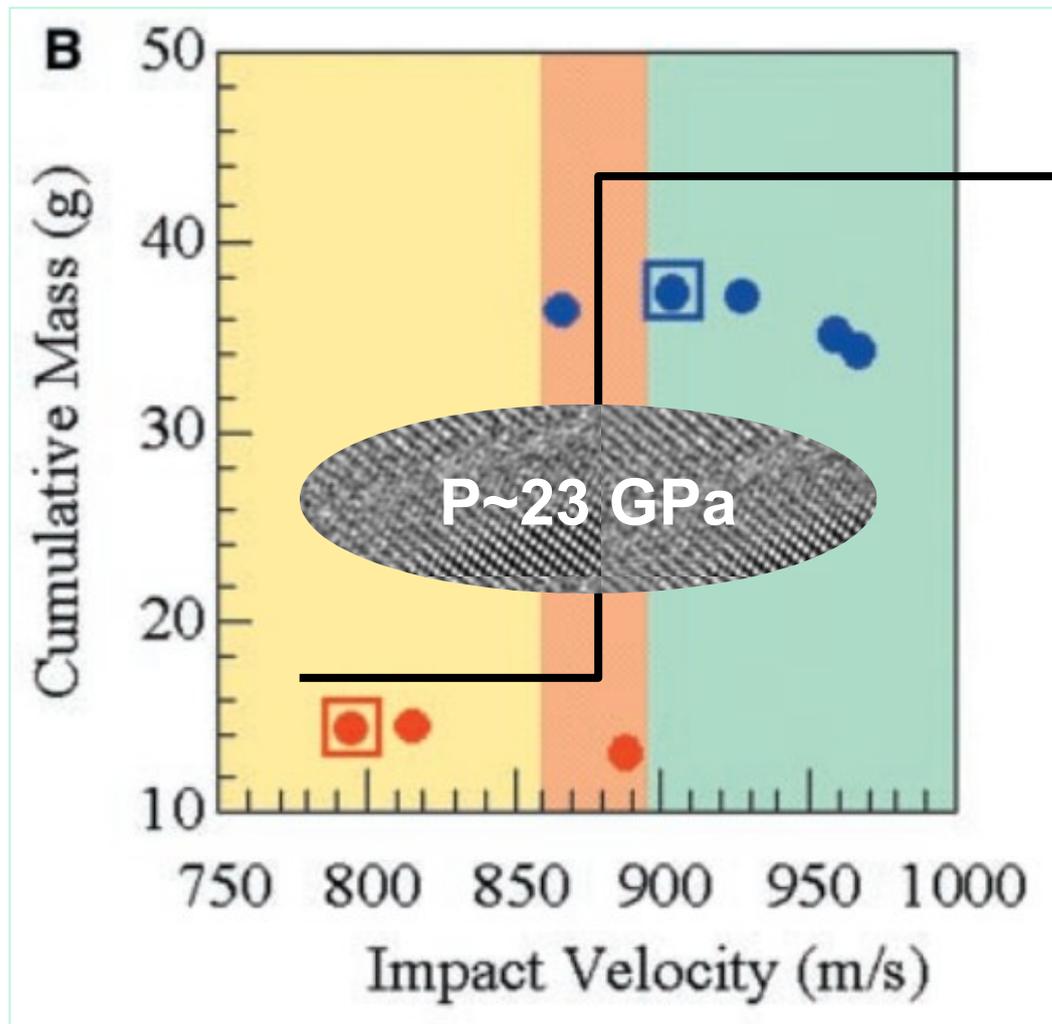
Легкость: 2.46 г/см<sup>3</sup> (2.52 г/см<sup>3</sup>)

Твердость:  $H_v=42$  GPa (37 GPa)

- ✓ Баллистическая защита
- ✓ Покрyтия против царапин
- ✓ Абразивные и шлифовальные инструменты



# Изменение механических свойств



- Ухудшение защитных свойств
- Потеря сдвиговой прочности
- Разупрочнение

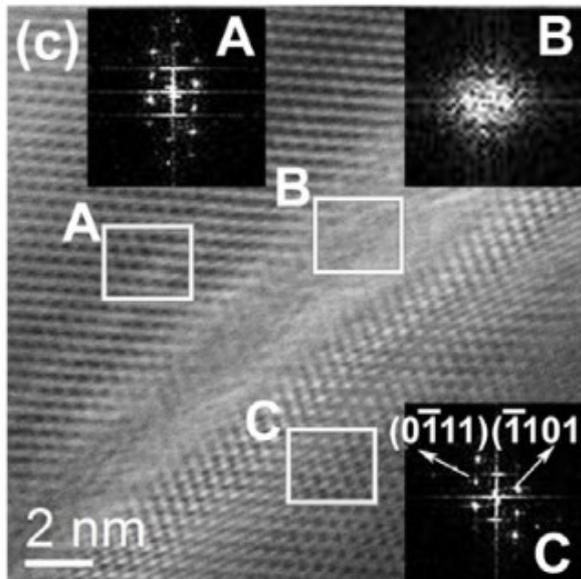


Chen **SCIENCE** (2003)

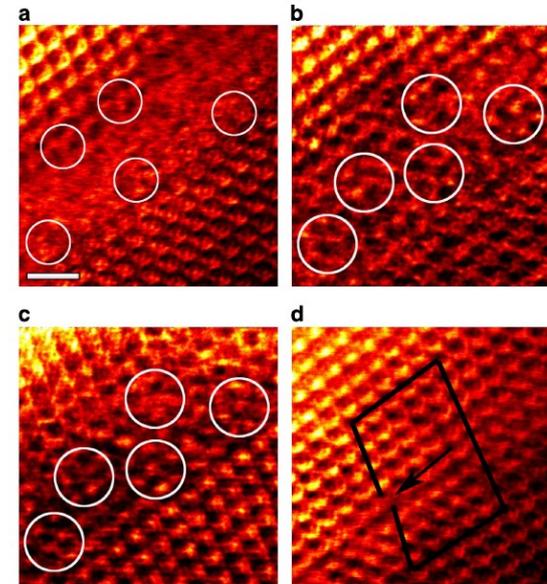
# Тонкие аморфные полосы

- ❑ Наноиндентирование
- ❑ Баллистическое соударение
- ❑ Алмазные наковальни
- ❑ Царапание

Наблюдаются  
в плоскостях  
 $\{210\}$ ,  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ ,  
 $\{111\}$ ,  $\{310\}$ ,  $\{-111\}$

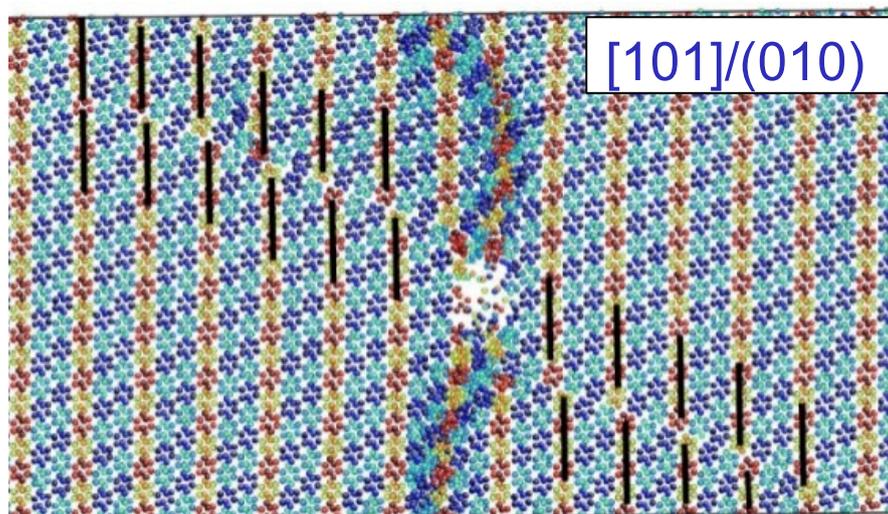


толщина  
~2-4 нм

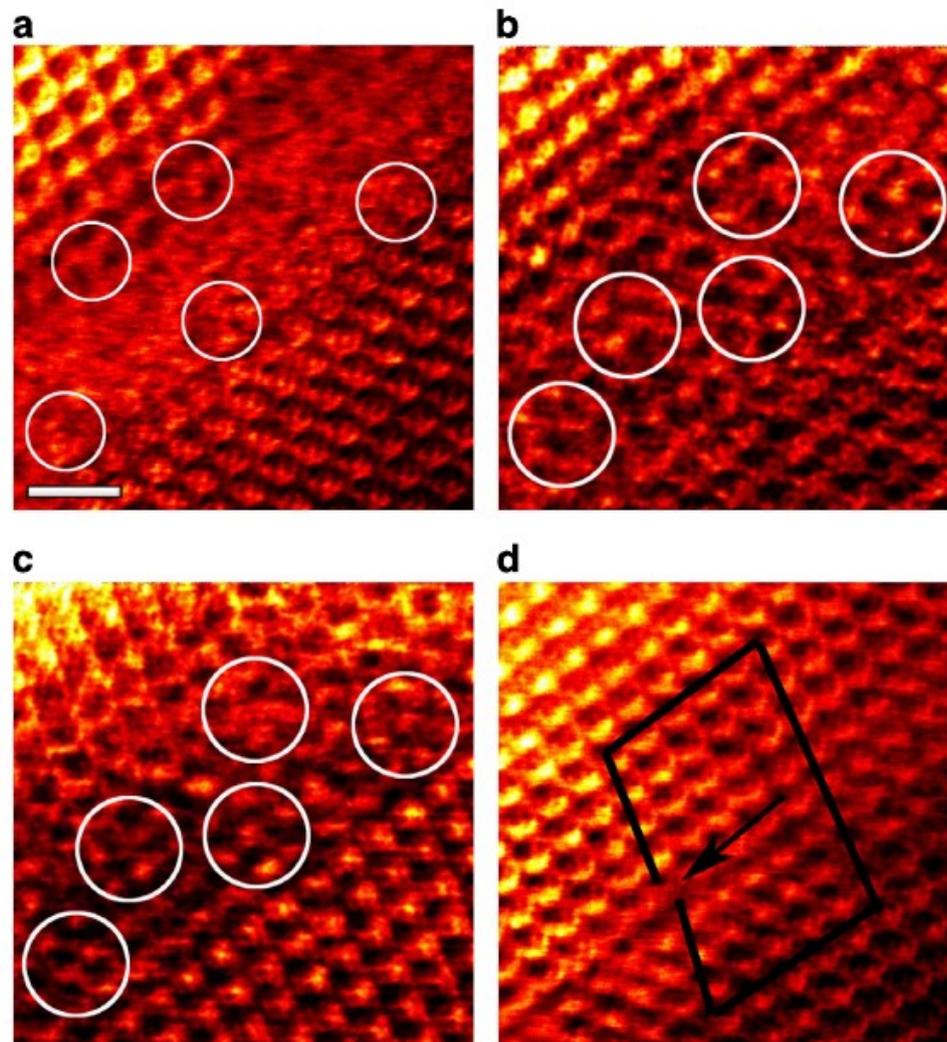


# Является ли сдвиг $[101]/(010)$ предвестником?

Аморфные зоны  
наблюдаются в  
плоскостях:  
 $\{210\}$ ,  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ ,  
 $\{111\}$ ,  $\{310\}$



$V_{\text{imp}} = 3 \text{ km/s}$ ,  $T = 4.2 \text{ ps}$



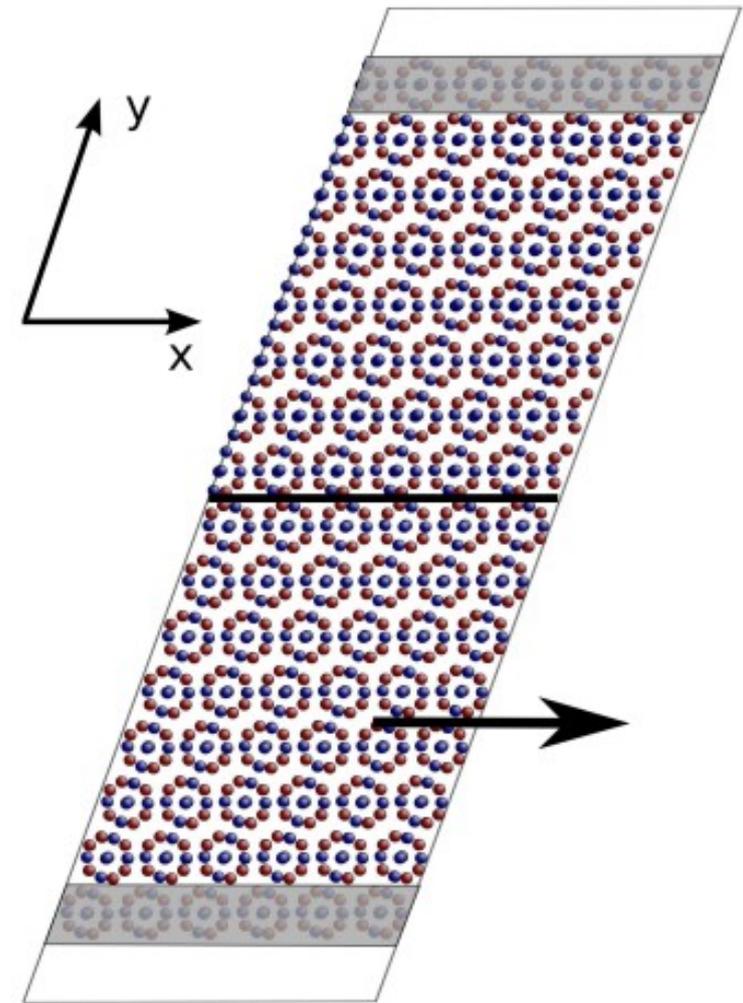
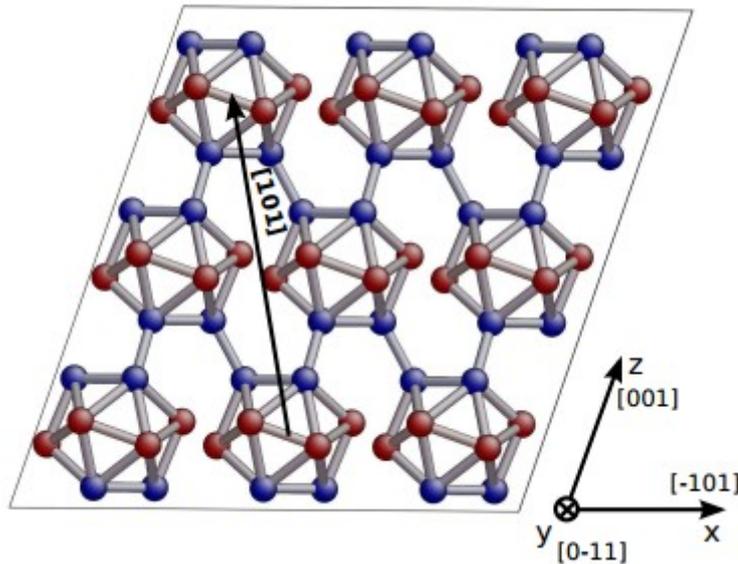
Reddy et al. (2003) Nature

# Статические расчеты

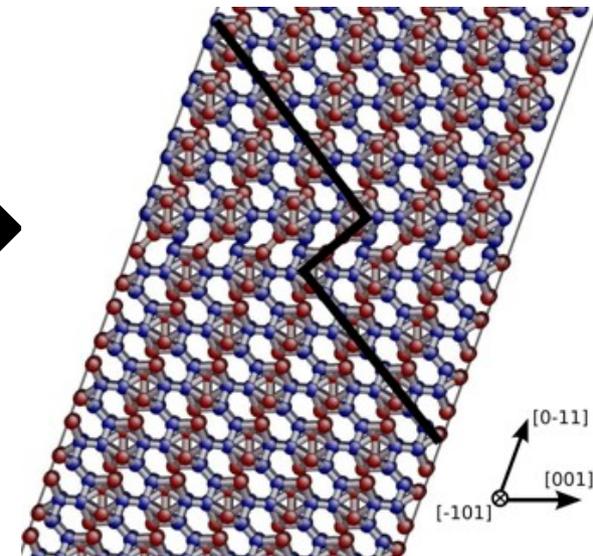
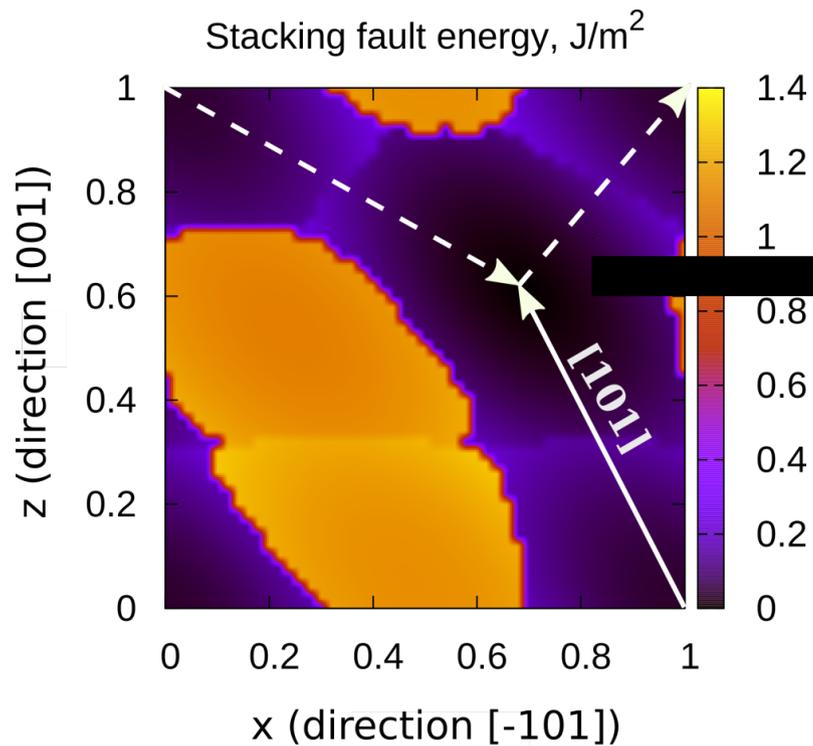


# $\gamma$ - поверхность

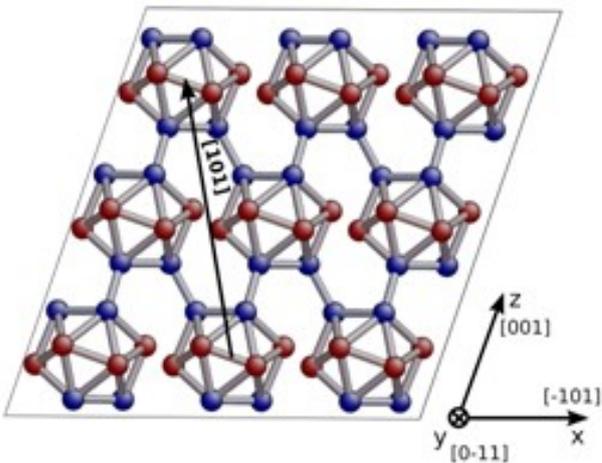
- Сдвиг в плоскости (010)  
[сетка 50 x 50]
- Минимизация энергии
- Построение  $\gamma$ -поверхности



# $\gamma$ -поверхность плоскости (010)



Активация системы  
скольжения  $[101]/(010)$   
приводит к нанодвойнику



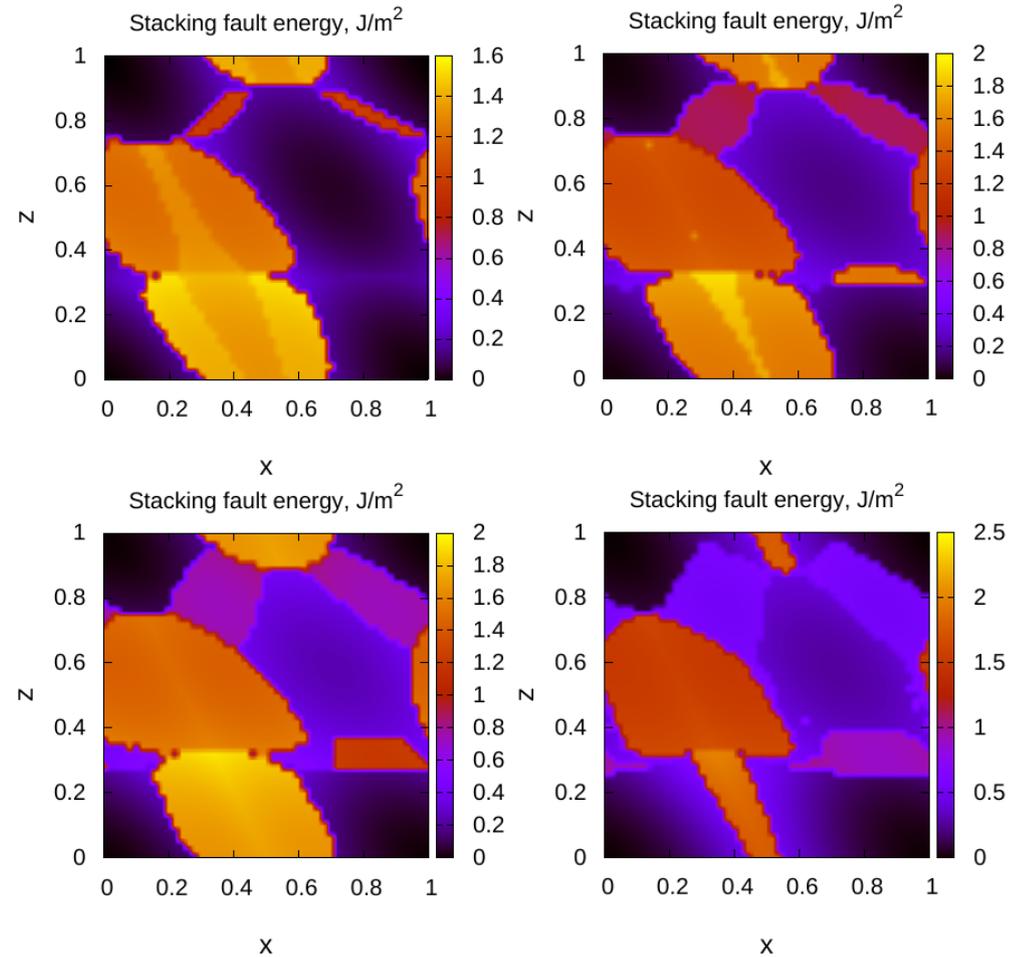
Наблюдается  
в  $\text{B}_6\text{O}$

# Нанодвойникование

Изменение гамма-поверхности  
с увеличением давления:  
10, 20, 30, 40 GPa.

Стабильный дефект  
при высоких  $T$ ,  $P$

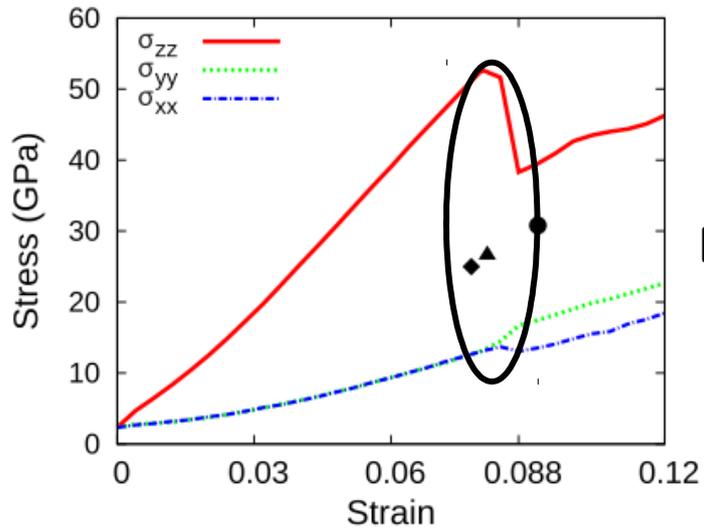
Аморфизация?



# Динамические расчеты

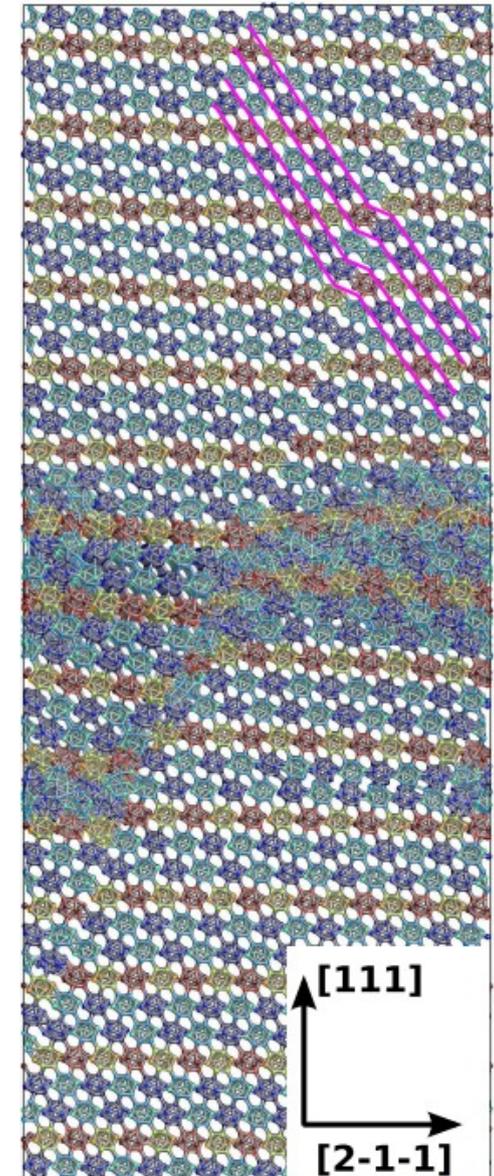
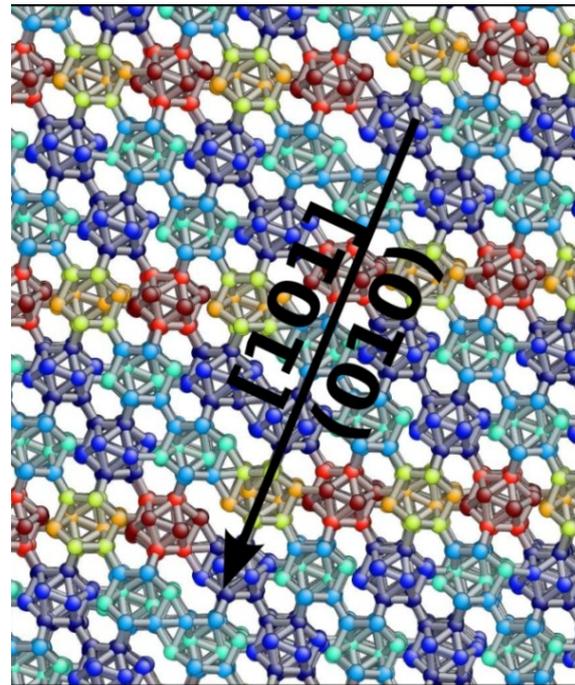


# Одноосное сжатие

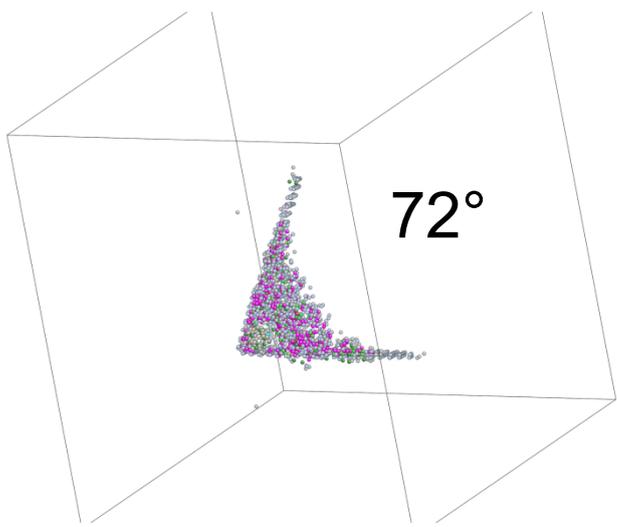
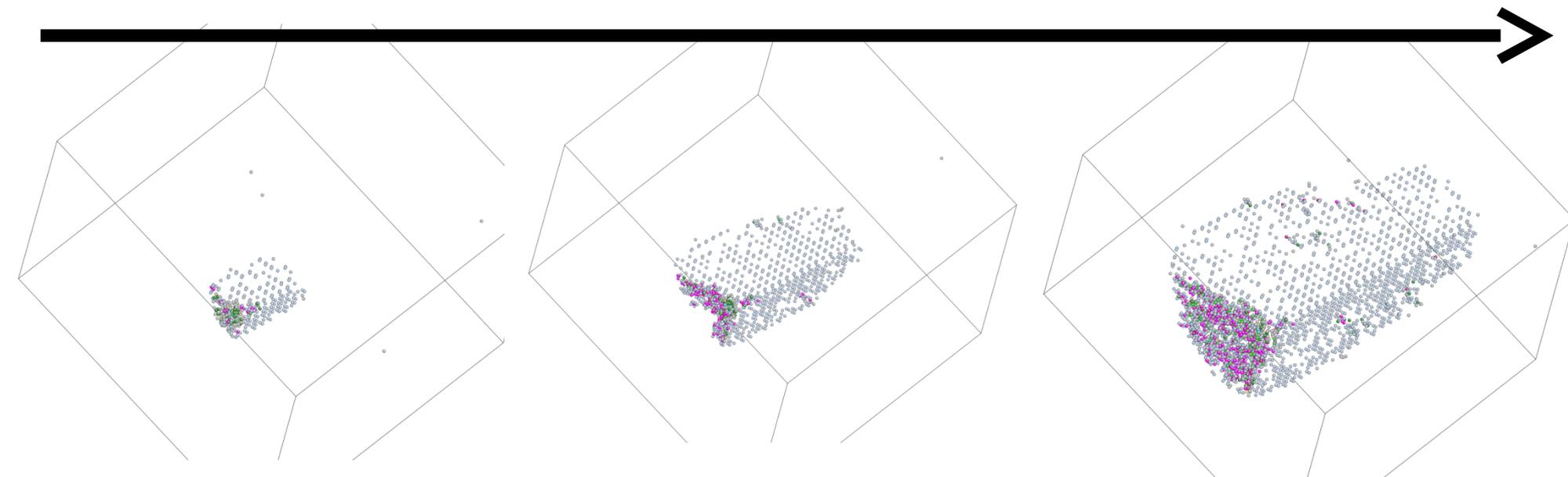


Одноосное сжатие вдоль направления  $[111]$  с «концентратором напряжений»

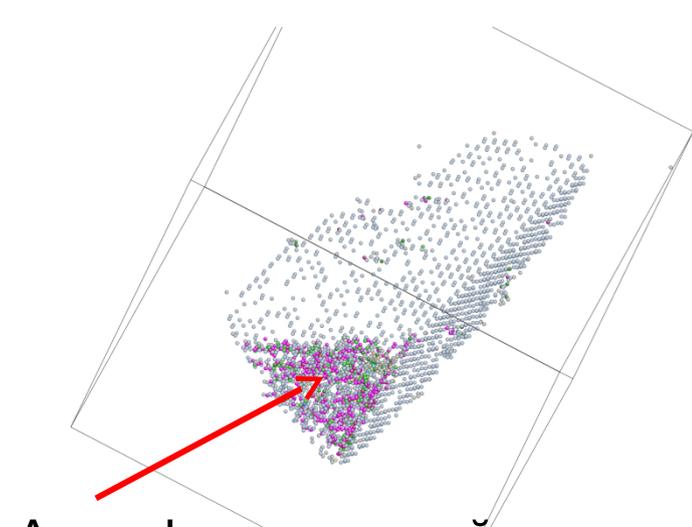
Сдвиг  $[101]/(010)$  и «аморфный дефект» активируются одновременно из одного места



# Аморфизация



72°

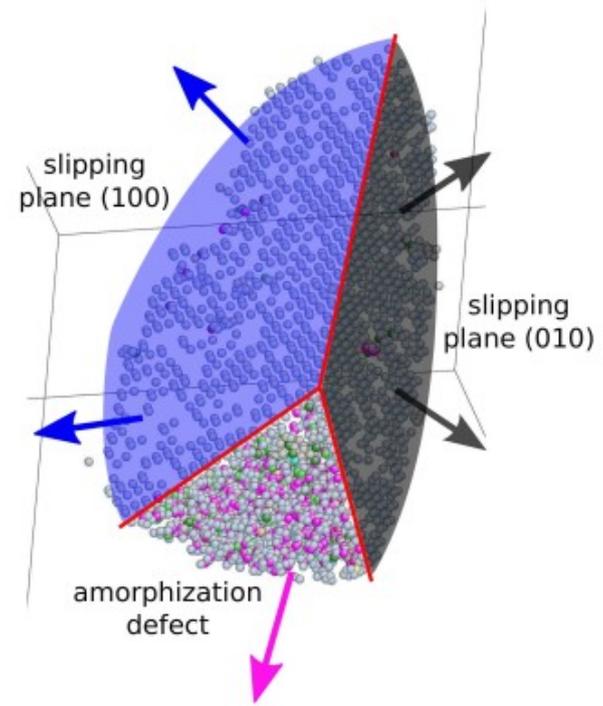
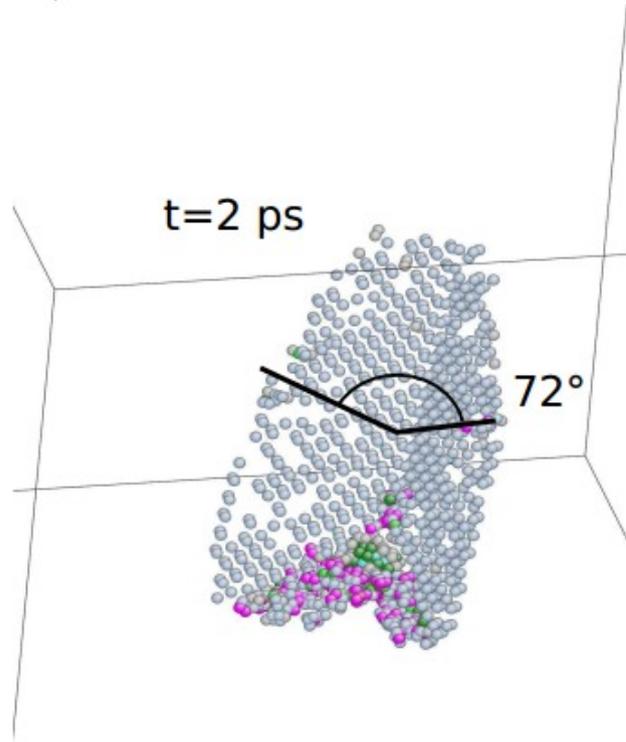
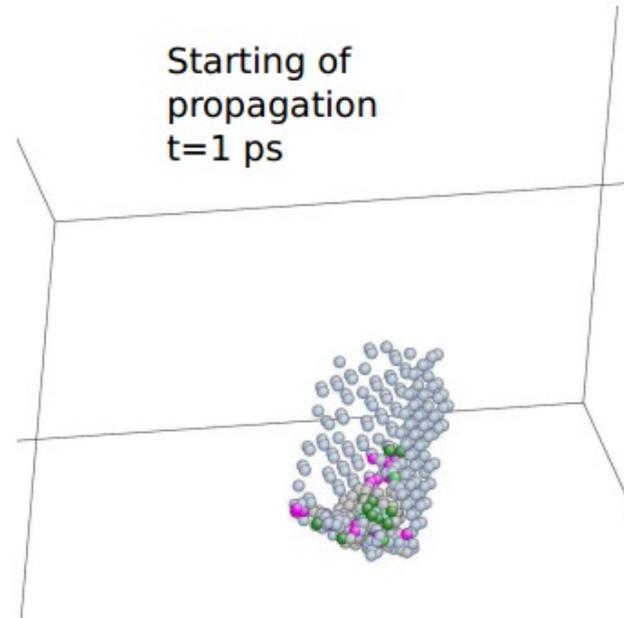
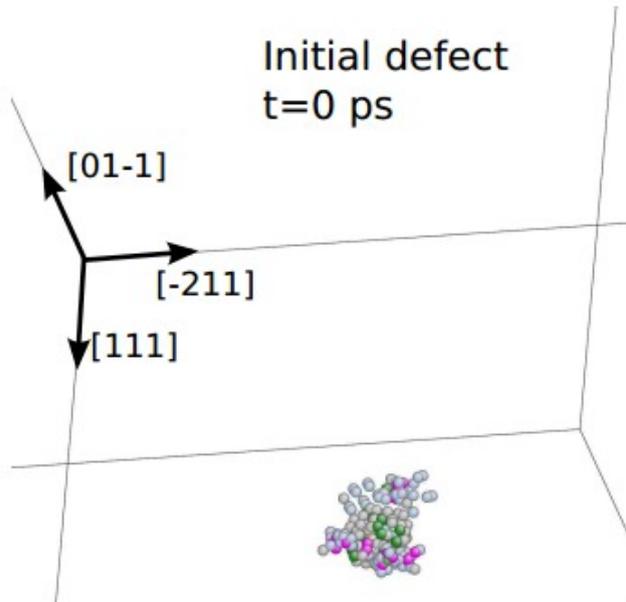


Аморфизационный  
дефект

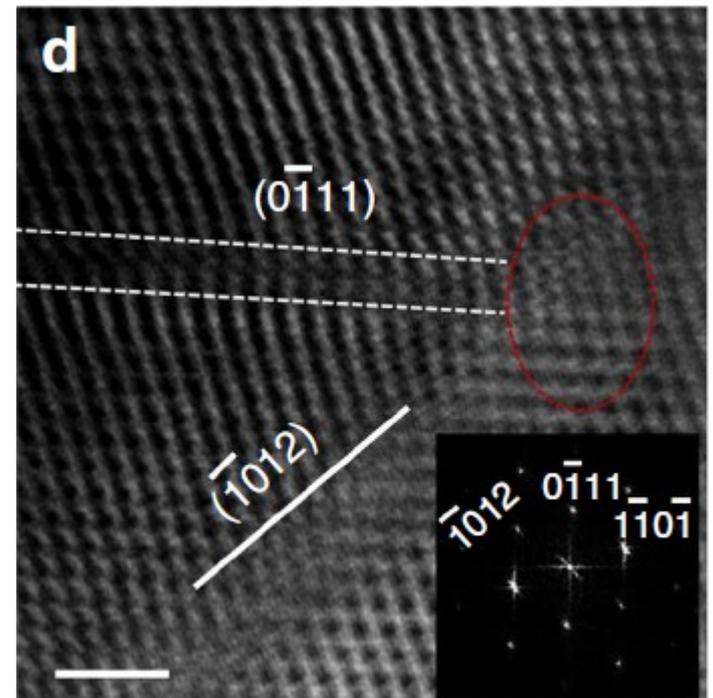
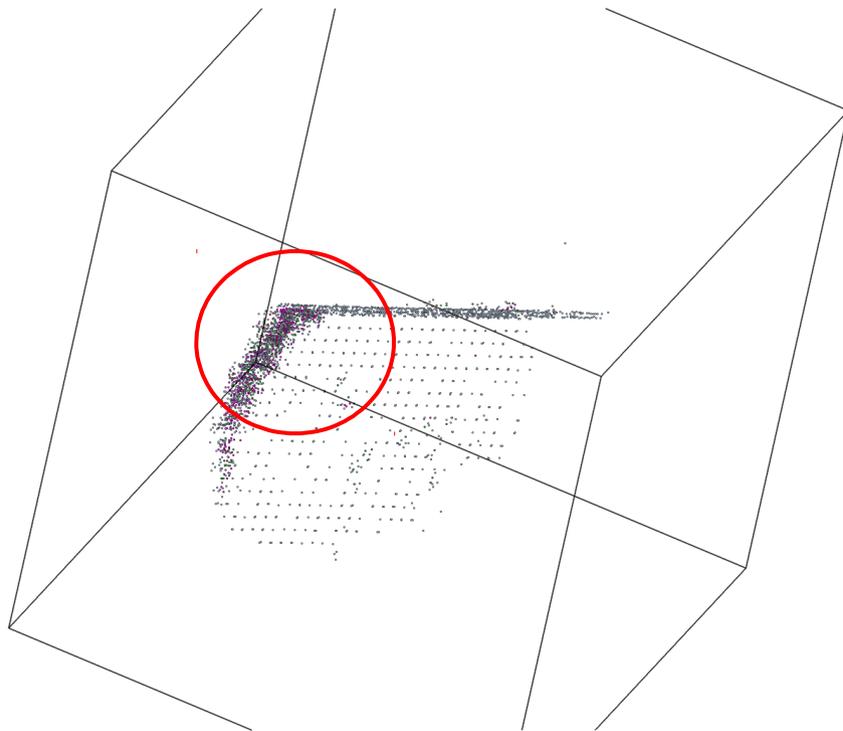
Strain rate  $10^8 \text{ s}^{-1}$

Угол между плоскостями  
(010) и (100) равен 72°





# Сдвиг и аморфизация



Qi An et al., **Nature** (2016)

Основание аморфной зоны  
соседствует со сдвигом  $[101]/$   
 $(010)$

# Растрескивание

Проскальзывание

Распространение трещины

$$\gamma_{\text{usf}} = 1.4 \text{ J/m}^2$$

<

$$2\gamma_s = 4.1 \text{ J/m}^2$$

Материал  
растрескивается только  
через аморфные зоны

Критерий Райса (1992)



# Выводы

- Активация сдвига  $[101]/(010)$  приводит к нанодвойникованию
- Нанодвойник — остается стабильным дефектом при высоких температурах и давлениях
- Нанодвойник и аморфизация начинаются в одном месте

P. Pokatashkin et al. *Phys. Rev. B* (2017)

