

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.374:538.913

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.004

ПОВЕДЕНИЕ СПЛАВА $\text{Fe}_{95}\text{Ni}_{05}$ С ГРАДИЕНТНОЙ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРОЙ И РАЗЛИЧНЫМ ФАЗОВЫМ СОСТАВОМ ПРИ НАНОИНДЕНТИРОВАНИИ

Александр Вячеславович Корчуганов^{1†}, Дмитрий Сергеевич Крыжевич²,
Александр Сергеевич Григорьев³, Олег Андреевич Березиков⁴,
Константин Петрович Зольников⁵

^{1-3,5} Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, пр. Академический, 2/4, 634055, Томск, Россия

⁴ Национальный исследовательский Томский государственный университет, пр. Ленина 36, 634050, Томск, Россия

¹ avkor@ispms.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-3765-5911>

² kryzhev@ispms.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1423-3724>

³ grigoriev@ispms.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9247-7222>

⁴ oberezikov7@ispms.ru, <https://orcid.org/0009-0001-1418-5742>

⁵ kost@ispms.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8988-1040>

Аннотация. Проведено молекулярно-динамическое изучение влияния фазового состава на физико-механические свойства и особенности структурных перестроек сплава $\text{Fe}_{95}\text{Ni}_{05}$ с градиентной зеренной структурой при наноиндентировании. Размер зерен в моделируемых образцах увеличивался с 10 до 30 нм от нагружаемой поверхности в направлении индентирования. В различных образцах объемная доля ОЦК фазы в ламелях каждого зерна с ГЦК решеткой составляла 0, 30 или 60%. Обнаружено, что увеличение объемной доли ОЦК фазы в ГЦК зернах понижает твердость сплава и увеличивает его пластичность. Зарождение пластической деформации при индентировании образцов связано с генерацией дислокаций в зоне контакта индентора с образцом с последующим формированием дефектов упаковки и двойников. Наиболее активно процессы пластической деформации развиваются по границам зерен и межфазным границам. По мере увеличения глубины вдавливания индентора существенный вклад в пластичность начинают вносить фазовые переходы ОЦК-ГЦК в ламелях зерен, находящихся в области воздействия индентора. Выявлено, что межфазные границы и границы зерен локализуют развитие пластичности в процессе наноиндентирования, препятствуя распространению дефектов структуры в более глубокие слои зерен. Увеличение объемной доли ОЦК фазы усиливает локализацию пластической деформации в нагружаемом материале.

Ключевые слова: молекулярная динамика, градиентная зеренная структура, наноиндентирование, пластическая деформация, фазовые переходы.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-79-10406, <https://rscf.ru/project/20-79-10406/>.

Для цитирования: Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С., Григорьев А.С., Березиков О.А., Зольников К.П. Поведение сплава $\text{Fe}_{95}\text{Ni}_{05}$ с градиентной зеренной структурой и различным фазовым составом при наноиндентировании. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 2. С. 164-173. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.004.

Original article

BEHAVIOR OF $Fe_{95}Ni_{05}$ ALLOY WITH GRADIENT GRAINED STRUCTURE AND DIFFERENT PHASE COMPOSITION DURING NANOINDENTATION

Aleksandr V. Korchuganov^{1†}, Dmitriy S. Kryzhevich², Aleksandr S. Grigoriev³, Oleg A. Berezhikov⁴, Konstantin P. Zolnikov⁵

^{1-3,5} Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2/4 Akademicheskii ave., Tomsk, 634055, Russia

⁴ National Research Tomsk State University, 36 Lenina ave., Tomsk, 634050, Russia

¹ avkor@ispms.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-3765-5911>

² kryzhev@ispms.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1423-3724>

³ grigoriev@ispms.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9247-7222>

⁴ oberezhikov7@ispms.ru, <https://orcid.org/0009-0001-1418-5742>

⁵ kost@ispms.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8988-1040>

Abstract. A molecular dynamics study of the effect of phase composition on the physical-mechanical properties and structural rearrangements of the gradient grained $Fe_{95}Ni_{05}$ alloy during nanoindentation was carried out. The grain size in the simulated samples increased from 10 to 30 nm from the loaded surface in the indentation direction. In different samples, the volume fraction of the BCC phase in the lamellae of each grain with the FCC lattice was 0, 30 or 60%. It was found that an increase in the volume fraction of the BCC phase in FCC grains reduces the hardness of the alloy and increases its ductility. The onset of plastic deformation during indentation of samples was associated with the generation of dislocations in the contact zone of the indenter with the sample, followed by the formation of stacking faults and twins. The processes of plastic deformation develop most actively along grain boundaries and interphase boundaries. As the indentation depth increases, the BCC-FCC phase transitions in lamellae of grains located in the indenter impact region begin to make a significant contribution to plasticity. It was found that interphase and grain boundaries localize the development of plasticity during nanoindentation, preventing the propagation of structural defects into deeper grain layers. An increase in the volume fraction of the BCC phase enhances the localization of plastic deformation in the loaded material.

Keywords: molecular dynamics, gradient grained structure, nanoindentation, plastic deformation, phase transitions.

Acknowledgements: The study was carried out at the financial support of the Russian Science Foundation (Project No. 20-79-10406), <https://rscf.ru/project/20-79-10406/>.

For citation: Korchuganov A.V., Kryzhevich D.S., Grigoriev A.S., Berezhikov O.A. & Zolnikov K.P. (2025). Behavior of $Fe_{95}Ni_{05}$ alloy with gradient grained structure and different phase composition during nanoindentation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(2), 164-173. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.004.

Введение

Иерархические материалы привлекают повышенный интерес благодаря своим уникальным функциональным свойствам. Они имеют высокую прочность и ударную вязкость, усталостную и радиационную стойкость, характеризуются малым трением и износом и т.д. Уникальные свойства во многом обусловлены гетерогенностью их микроструктуры, особенностями распределения фаз и химического состава по объему материала. Наличие одного или нескольких видов гетерогенности может приводить к существенному синергетическому улучшению физико-механических свойств материала. Взаимосвязь параметров гетерогенно-

сти с поведением иерархических материалов при различных внешних воздействиях активно изучается и является одной из наиболее актуальных задач современного материаловедения. Исследования иерархических материалов проводились применительно к бимодальной [1] и градиентной [2] двухфазным сталям, иерархическим двойниковым структурам в нанокристаллических материалах [3], метастабильной двухфазной стали с наноламельной структурой [4], ламинатам из крупных и мелких зерен с градиентом химического состава [5] и т.д. Механизмы одновременного влияния нескольких видов гетерогенности и их взаимодействия между собой, определяющие физико-механические свойства материала, во многом

неясны и требуют подробного изучения. Корреляция между параметрами гетерогенности и процессами, протекающими на микроскопическом уровне, наиболее эффективно может быть исследована на основе использования метода молекулярной динамики. Целесообразность изучения поведения материалов на атомном уровне может быть обусловлена рядом причин [1]. Одна из них связана с созданием наноразмерных образцов и наноструктур, для которых отклик на внешние воздействия имеет свои особенности. Другая причина заключается в необходимости создания базы данных по особенностям поведения иерархических материалов на атомном уровне, которая будет востребована для создания надежных конструкций. Кроме того, атомистическое моделирование позволит глубже понять влияние различного рода интерфейсов, гетерогенности зеренной структуры, фазового и химического состава на поведение материала на макромасштабном уровне. Моделирование поведения материалов на атомном уровне дает также представление о точности математических моделей более высокого масштабного уровня, например, для моделирования методом конечных элементов.

Отметим, что для изучения таких физико-механических характеристик материалов, как упругие модули, твердость, вязкость, а также особенностей зарождения и развития пластической деформации широко используется индентирование, которое представляет собой процесс локального контактного взаимодействия двух тел [6-8]. Процессы, протекающие при контакте тел на атомном уровне, с высокой точностью могут быть описаны на основе молекулярно-динамического моделирования [9-13]. При этом, деформационное поведение моделируемого материала при наноиндентировании существенно зависит от ряда факторов. Так, в работе [9] исследовано влияние выбора потенциалов межатомного взаимодействия, размеров подложки и индентора, скорости индентора на особенности образования дефектов в гранецентрированных и объемноцентрированных кубических материалах при наноиндентировании. Влияние ориентации нагружаемой поверхности в ГЦК материалах при наноиндентировании на упругость и пластичность была показана в работе [10]. Была установлена сильная связь между дислокационной активностью, ориентацией поверхности и глубиной вдавливания индентора. Зарождение дислокаций при напряже-

ниях выше порогового значения приводило к падению нагрузки. Эта взаимосвязь была подтверждена экспериментально в работах [11,12]. Молекулярно-динамическое моделирование процесса наноиндентирования успешно использовалось для изучения особенностей зарождения и развития пластичности в материалах с достаточно сложными структурами, включая высокоэнтропийные аморфные/кристаллические двухфазные материалы [13,14] и материалы, содержащие нанодвойники различной толщины [15]. В настоящее время практически не изученным является поведение при наноиндентировании двухфазных материалов с градиентом зерен по размеру в поверхностном слое, представляющих огромный интерес для ряда практических приложений. Данная статья направлена на восполнение этого пробела в исследованиях.

Целью настоящей работы является исследование особенностей зарождения и развития пластичности в сплаве $\text{Fe}_{95}\text{Ni}_{05}$ с градиентной зеренной структурой и различным фазовым составом при наноиндентировании.

Формализм расчетов

Поставленные в работе задачи решались в рамках метода молекулярной динамики с использованием программного пакета LAMMPS [16]. В качестве объектов исследования был выбран однофазный образец $\text{Fe}_{95}\text{Ni}_{05}$ с ГЦК решеткой и два двухфазных образца $\text{Fe}_{95}\text{Ni}_{05}$ с ГЦК и ОЦК решетками с градиентными зеренными структурами. Моделируемые образцы были построены на основе метода Вороного-Лагерра (Рис. 1). Построенные образцы в направлении оси Z состояли из пяти слоев зерен, каждый из которых содержал зерна одинакового размера. По мере удаления от нагружаемой поверхности размеры зерен в слоях увеличивались и составляли 10, 12, 15, 20 и 30 нм. При этом зерна имели общее кристаллографическое направление, совпадающее с осью текстуры Z с индексами [123], вдоль которого они были разориентированы на углы не менее 30 градусов (Рис. 1). В случае двухфазных образцов в ГЦК зернах содержались ламели с ОЦК структурой. Образцы с объемной долей ОЦК фазы 0, 30 и 60 % обозначались как G00, G30 и G60, соответственно. Моделируемые образцы имели форму параллелепипедов, и их размеры составляли $120 \times 120 \times 87$ нм в направлении осей

X, Y и Z, соответственно. Исходная температура образцов равнялась 300 К.

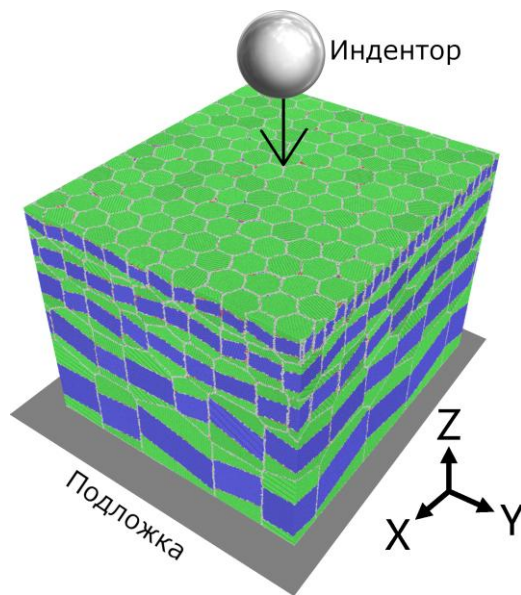


Рис. 1. Исходная структура и распределение фаз в образце G60. Зеленым и синим обозначены атомы с ГЦК и ОЦК симметрией расположения ближайших соседей, соответственно, серым – атомы, принадлежащие интерфейсам. Верхний слой атомов, толщиной 0,1 нм, не показан

Fig. 1. Initial structure and phase distribution in the G60 sample. Green and blue colors indicate atoms with FCC and BCC symmetry of the nearest neighbors, respectively, gray color indicates atoms belonging to interfaces. The upper 0.1 nm thick atomic layer is not shown

Индентор представлял собой отталкивающее поле сферической формы, взаимодействие которого с атомами образца описывалось формулой:

$$F(r) = \begin{cases} -K(R - r)^2, & r < R \\ 0, & r \geq R \end{cases} \quad (1)$$

где K – полевая константа, R – радиус индентора, r – расстояние от центра индентора. Константа K равнялась $10 \text{ эВ}/\text{\AA}^3$, а радиус индентора R – 20 нм. Индентор смещался в вдоль оси Z со скоростью 10 м/с. Тыльная поверхность к направлению нагружения фиксировалась неподвижной подложкой в форме абсолютно жесткой отталкивающей стенки, а в двух других направлениях моделировались периодические граничные условия. Для усреднения данных расчета было проведено по 3 индентирования в каждом образце, отличающихся местом вдавливания

индентора в нагружаемую поверхность. Сначала индентор вдавливался на глубину 7.8 нм со скоростью 10 м/с, а затем до глубины 8.0 нм его скорость уменьшалась по линейному закону до нуля. После остановки индентора образец релаксировался в течение 1 нс.

Межатомное взаимодействие в системе Fe-Ni описывалось многочастичным потенциалом, разработанным в приближении метода погруженного атома [17]. Визуализация структуры образцов проводилась с помощью программы OVITO [18]. Для идентификации структурных изменений в нагружаемых образцах были использованы алгоритмы анализа по общим соседям [19]. Напряжения по Мизесу вычислялись по формуле:

$$\sigma_M = \sqrt{\frac{3[\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2] + \frac{1}{2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2]}{2}}, \quad (2)$$

где σ_{mn} – компоненты тензора напряжений.

Для расчета интенсивности деформаций использовалась формула:

$$E = \sqrt{\frac{\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2 + \frac{1}{6}[(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})^2]}{2}}, \quad (3)$$

где ε_{mn} – компоненты тензора деформаций.

Расчет твердости проводился по формуле:

$$H = \frac{P}{A_c}, \quad (4)$$

где P – сила, действующая на индентор, A_c – площадь контакта индентора с образцом.

Расчет напряжений по Мизесу, деформаций и количества атомов в ОЦК фазе, представленный на графиках, проводился в объеме цилиндра под индентором. Радиус цилиндра равнялся 10 нм, а его ось совпадала с направлением нагружения и проходила через центр индентора.

Результаты и обсуждение

Для изучения влияния различных объемных долей ОЦК-фазы на механический отклик моделируемых образцов в процессе наноиндентирования были построены кривые зависимости силы реакции образца (P) от глубины вдавливания индентора (h) (Рис. 2). Упругий интервал вдавливания индентора очень мал, и силы реакции всех моделируемых образцов одинаковы, поскольку нагружаемые поверхностные

слои всегда имеют ГЦК фазу и состоят из зерен с одинаковыми размерами и кристаллографическими ориентациями друг относительно друга. Такой отклик указывает на совпадение модулей Юнга исследуемых образцов. На Рис. 2 хорошо видно, что зависимости $P-h$ на приведенном интервале вдавливания имеют практически линейный характер. При этом, увеличение объемной доли ОЦК фазы ведет к уменьшению силы реакции P с ростом h . Для того чтобы лучше понять влияние фазового состава на механический отклик образца при индентировании в работе был проведен расчет нанотвердости по формуле (3). Результаты расчета для образцов с разной объемной долей ОЦК фазы при глубине вдавливания индентора 7.8 нм представлены на Рис. 3. На рисунке хорошо видно, что с увеличением объемной доли ОЦК фазы нанотвердость образцов понижается.

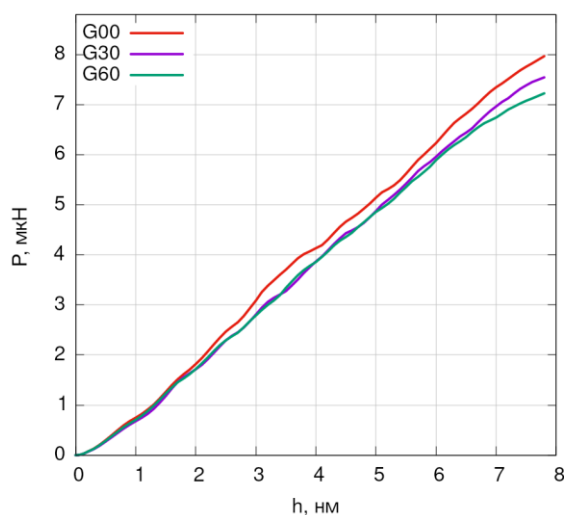


Рис. 2. Зависимости силы реакции от глубины вдавливания индентора для образцов с различной объемной долей ОЦК фазы

Fig. 2. Dependences of the reaction force on the indentation depth for samples with different volume fractions of the BCC phase

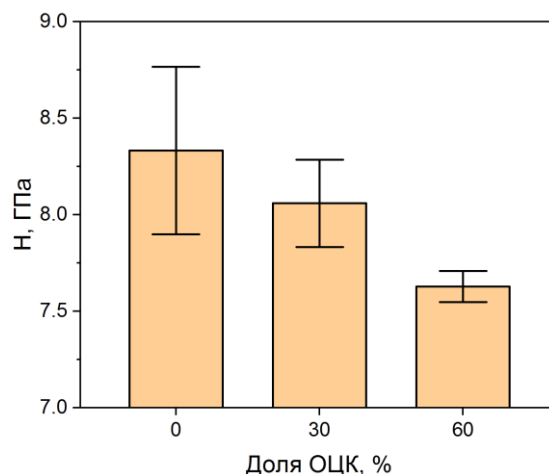


Рис. 3. Твердость образцов с различной объемной долей ОЦК фазы для $h=7.8$ нм

Fig. 3. Hardness of samples with different volume fractions of the BCC phase at $h=7.8$ nm

Проекция структуры для образцов с разной объемной долей ОЦК фазы при вдавливании индентора на глубину 7.8 нм показаны на Рис. 4а. В процессе индентирования по мере высвобождения запасенной упругой энергии в образце генерируются дислокации, дефекты упаковки и двойники. Первоначально дислокации зарождаются в зоне контакта индентора с образцом на концентраторах напряжений, которыми являются границы зерен. На Рис. 4а следы от двух соседних атомных плоскостей красного цвета представляют собой дефекты упаковки вычитания, а след от одной плоскости – границу двойников. На Рис. 4б хорошо видно, что зона пластической деформации ограничена тремя-четырьмя слоями зерен в направлении нагружения. При этом, наибольшие пластические деформации произошли в зоне контакта индентора с образцом (выделено красным цветом), а также по границам зерен и межфазным границам (выделено светло-серым цветом). В двух других направлениях зона пластической деформации не распространяется далее вторых зерен от поверхности индентора. На Рис. 4в показано распределение напряжений по Мизесу для сечения образцов в плоскости YZ. Анализ результатов показывает, что максимальные напряжения наблюдаются на межфазных интерфейсах, границах зерен и тройных стыках. Более детально распределение напряжений по Мизесу в направлении оси Z для образцов G00 и G60 показано на Рис. 5. Вертикальные пунк-

тирные линии на рисунке отделяют слои с разным размером зерен. При этом в ненагруженном состоянии ($h=0$ нм) положения максимальных атомных напряжений внутри каждого слоя соответствуют межфазным границам, а максимумы в окрестности пунктирных вертикальных линий обусловлены более высокой плотностью границ зерен в межслоевых областях. Эти особенности распределения локальных максимумов на кривых сохраняются на протяжении всего процесса индентирования, а также после остановки и релаксации структуры для обоих образцов. Необходимо отметить, что одним из наиболее активных процессов пластической деформации при индентировании является фазовый переход ОЦК-ГЦК в ламелях двухфазных образцов. Количество атомов, составляющих ОЦК структуру в слоях образца, для различных глубин вдавливания индентора и после его остановки показано на Рис. 6. Хорошо видно, что доля ОЦК фазы по мере индентирова-

ния понижается вследствие фазовых переходов ОЦК-ГЦК, а положение ламелей, особенно в первом и втором слое, смещается в направлении индентирования.

Анализ интенсивности деформаций показывает, что ОЦК ламели способствуют локализации пластической деформации в окрестности индентора. Это связано с тем, что ОЦК ламели препятствуют распространению пластической деформации вглубь образца. ОЦК фаза более пластичная, фазовый переход ОЦК-ГЦК в ней позволяет произойти большему количеству пластических сдвигов, пусть меньших по абсолютной величине чем сдвиги от дислокаций, но за счет многочисленности дающих больший суммарный вклад в деформацию. Большой объем ОЦК фазы в образце G60 позволяет ему локализовать большую часть пластической деформации в поверхностном слое зерен, оставляя второй и третий слои менее деформированными.

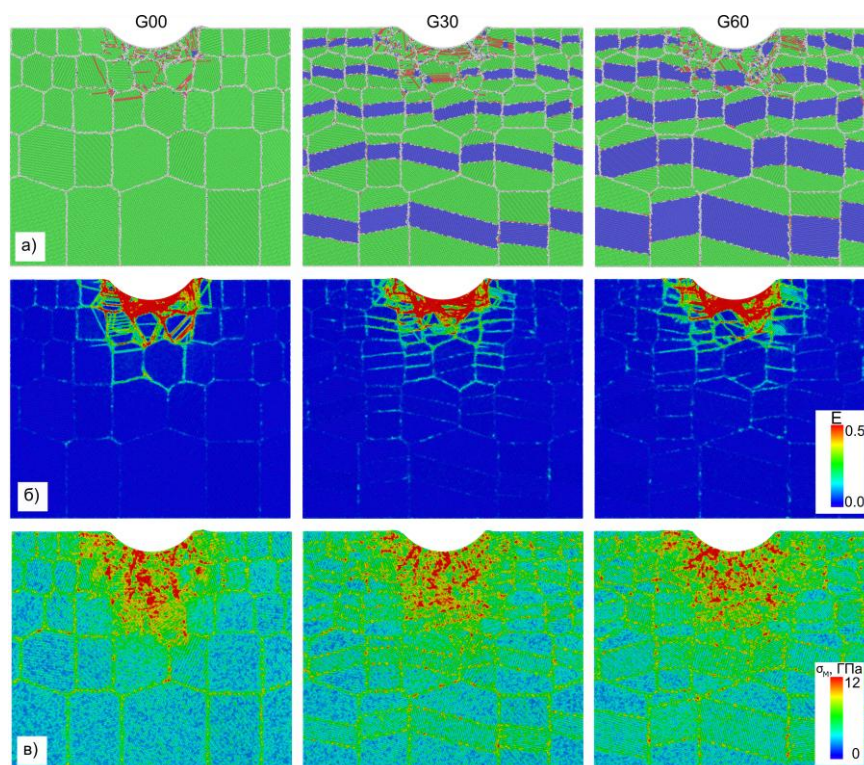


Рис.4. Структура (а), распределение интенсивности деформаций (б) и напряжений по Мизесу (в) для образцов с различной долей ОЦК фазы при $h=7.8$ нм. Показан слой толщиной 1 нм по нормали к оси X. На рисунке (а) зеленый, синий, красный и серый цвет обозначают атомы с ГЦК, ОЦК, ГПУ и неопределенной симметрией расположения ближайших соседей, соответственно

Fig. 4. Structure (a), distribution of strain intensity (b) and von Mises stress (c) for samples with different volume fractions of the BCC phase at $h=7.8$ nm. A 1 nm thick layer normal to the X axis is shown. In the figure (a), green, blue, red and gray colors indicate atoms with FCC, BCC, HCP and undefined symmetry of the nearest neighbors, respectively

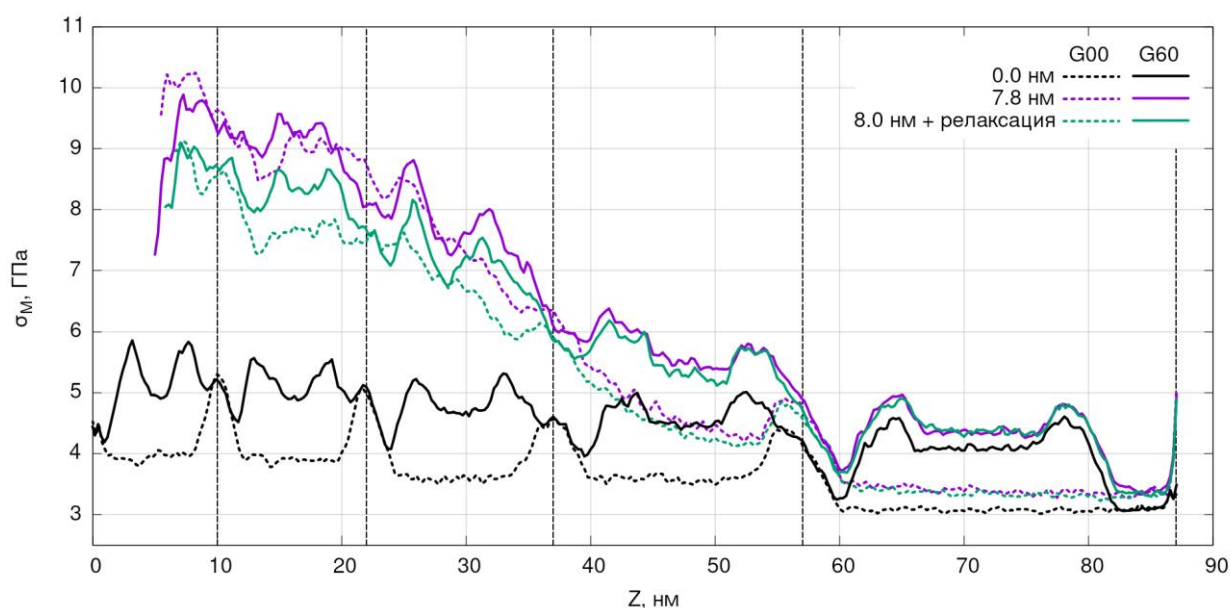


Рис. 5. Распределение напряжений по Мизесу вдоль оси Z в цилиндрической области под индентором для образцов G00 и G60 при различных глубинах вдавливания индентора и после его остановки и релаксации образца

Fig. 5. Distribution of von Mises stresses along the Z axis in the cylindrical region under the indenter for samples G00 and G60 at different indentation depths and after stopping of indenter and sample relaxation

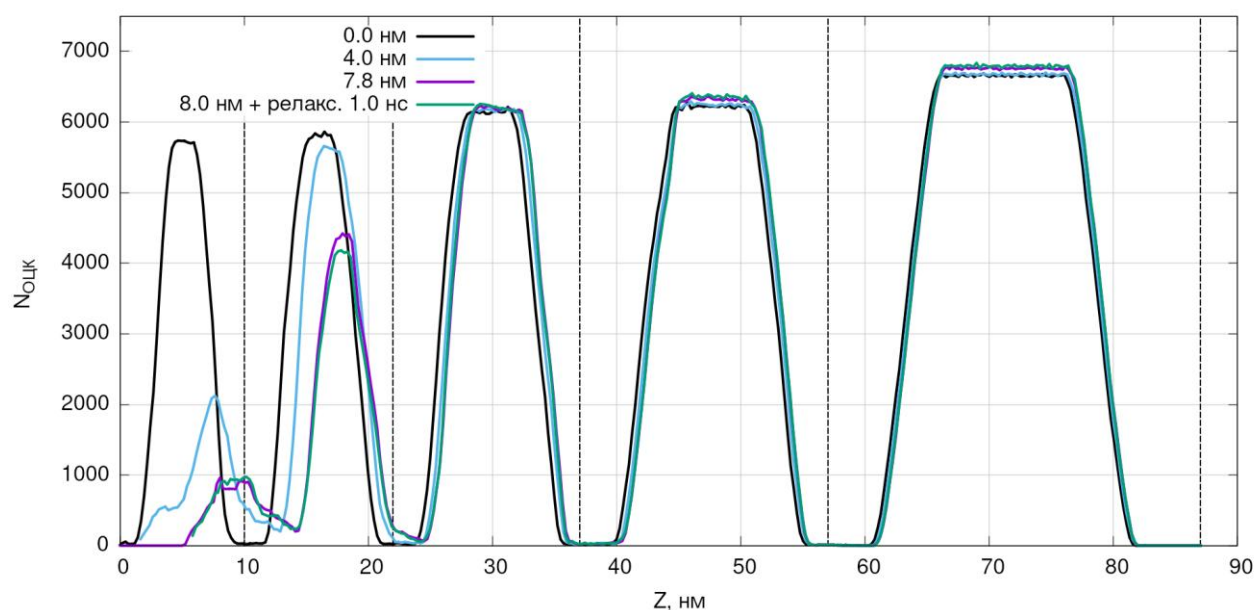


Рис. 6. Распределение количества атомов с ОЦК симметрией расположения ближайших соседей вдоль оси Z в цилиндрической области под индентором для образца G60 при различных глубинах вдавливания индентора и после его остановки и релаксации образца

Fig. 6. Distribution of the number of atoms with the BCC symmetry of the nearest neighbors along the Z axis in the cylindrical region under the indenter for the G60 sample at different depths of indentation and after stopping of indenter and sample relaxation

Заключение

Результаты моделирования процесса индентирования показали, что с ростом объемной доли ОЦК фазы в ламелях двухфазных образцов FeNi с градиентной зеренной структурой пластичность возрастает, а твердость понижается. Увеличение доли ОЦК фазы в зернах позволяет сильнее локализовать область пластической деформации в окрестности индентора. Начальная стадия пластической деформации образцов обусловлена генерацией дислокаций в зоне контакта индентора с поверхностью образца. В последующем в развитие пластичности существенный вклад начинают вносить процессы в границах раздела зерен и фаз. По мере вдавливания индентора в зернах, прилегающих к индентору, происходит перестройка структуры ОЦК ламелей в ГЦК решетку.

Список литературы

1. Arora H.S., Ayyagari A., Saini J., Selvam K., Riyadh S., Pole M., Grewal H.S., Mukherjee S. High Tensile Ductility and Strength in Dual-phase Bimodal Steel through Stationary Friction Stir Processing // *Scientific Reports*. 2019. V. 9, № 1. P. 1972.
2. Cao S.C., Liu J., Zhu L., Li L., Dao M., Lu J., Ritchie R.O. Nature-Inspired Hierarchical Steels // *Scientific Reports*. 2018. V. 8, № 1. P. 5088.
3. Sun L., He X., Lu J. Nanotwinned and hierarchical nanotwinned metals: A review of experimental, computational and theoretical efforts // *npj Computational Materials*. 2018. V. 4, № 1. P. 6.
4. Koyama M., Zhang Z., Wang M., Ponge D., Raabe D., Tsuzaki K., Noguchi H., Tasan C.C. Bone-like crack resistance in hierarchical metastable nanolaminate steels // *Science*. 2017. V. 355, № 6329. P. 1055–1057.
5. Wu H., Huang M., Li Q., Wu J., Li J., Wang Z., Fan G. Manipulating the plastic strain delocalization through ultra-thinned hierarchical design for strength-ductility synergy // *Scripta Materialia*. 2019. V. 172. P. 165–170.
6. Javaid F., Pouriaevali H., Durst K. Dislocation–grain boundary interactions: recent advances on the underlying mechanisms studied via nanoindentation testing // *Journal of Materials Research*. 2021. V. 36, № 12. P. 2545–2557.
7. Головин Ю.И. Наноиндентирование и механические свойства материалов в субмикронном и наномасштабе. Недавние результаты и достижения // *Физика Твердого Тела*. 2021. Т. 63, № 1. С. 3.
8. Ruestes C.J., Alhafez I.A., Urbassek H.M. Atomistic studies of nanoindentation—A review of recent advances // *Crystals*. 2017. V. 7, № 10. P. 293.
9. Luu H.T., Dang S.L., Hoang T.V., Gunkelmann N. Molecular dynamics simulation of nanoindentation in Al and Fe: On the influence of system characteristics // *Applied Surface Science*. 2021. V. 551. P. 149221.
10. Ziegenhain G., Urbassek H.M., Hartmaier A. Influence of crystal anisotropy on elastic deformation and onset of plasticity in nanoindentation: A simulation study // *Journal of Applied Physics*. 2010. V. 107, № 6. P. 061807.
11. Kiely J., Houston J. Nanomechanical properties of Au (111), (001), and (110) surfaces // *Physical Review B*. 1998. V. 57, № 19. P. 12588–12594.
12. Minor A.M., Syed Asif S.A., Shan Z., Stach E.A., Cyrankowski E., Wyrobek T.J., Warren O.L. A new view of the onset of plasticity during the nanoindentation of aluminium // *Nature Materials*. 2006. V. 5, № 9. P. 697–702.
13. Han R.C., Song H.Y., Li S., Guo T. Atomistic simulation of nanoindentation behavior of amorphous/crystalline dual-phase high entropy alloys // *Journal of Materials Science and Technology*. 2024. V. 197. P. 46–56.
14. Qiu Y., Qi Y., Zheng H., He T., Feng M. Atomistic simulation of nanoindentation response of dual-phase nanocrystalline CoCrFeMnNi high-entropy alloy // *Journal of Applied Physics*. 2021. V. 130, № 12. P. 125102.
15. Lv Z., Mao Y., Zhang Q., Liu Y., Li R. Molecular dynamics analysis on the indentation hardness of nano-twinned nickel // *Materials Today Communications*. 2023. V. 37. P. 107313.
16. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117, № 1. P. 1–19.
17. Zhou X.W., Foster M.E., Sills R.B. An Fe-Ni-Cr embedded atom method potential for austenitic and ferritic systems // *Journal of Computational Chemistry*. 2018. V. 39, № 29. P. 2420–2431.
18. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. V. 18, № 1. P. 015012.

19. Honeycutt J.D., Andersen H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // *Journal of Physical Chemistry*. 1987. V. 91, № 19. P. 4950–4963.

Информация об авторах

А.В. Корчуганов – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

Д.С. Крыжевнич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

А.С. Григорьев – младший научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

О.А. Березиков – магистрант кафедры физики металлов физического факультета Национального исследовательского Томского государственного университета; лаборант-исследователь Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

К.П. Зольников – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

References

1. Arora, H. S., Ayyagari, A., Saini, J., Selvam, K., Riyadh, S., Pole, M., Grewal, H.S. & Mukherjee, S. (2019). High tensile ductility and strength in dual-phase bimodal steel through stationary friction stir processing. *Scientific Reports*, 9(1), 1972.
2. Cao, S. C., Liu, J., Zhu, L., Li, L., Dao, M., Lu, J., & Ritchie, R. O. (2018). Nature-Inspired Hierarchical Steels. *Scientific Reports*, 8(1), 5088.
3. Sun, L., He, X., & Lu, J. (2018). Nanotwinned and hierarchical nanotwinned metals: A review of experimental, computational and theoretical efforts. *npj Computational Materials*, 4(1), 6.
4. Koyama, M., Zhang, Z., Wang, M., Ponge, D., Raabe, D., Tsuzaki, K., Noguchi, H., & Tasan, C. C. (2017). Bone-like crack resistance in hierarchical metastable nanolaminate steels. *Science*, 355(6329), 1055–1057.
5. Wu, H., Huang, M., Li, Q., Wu, J., Li, J., Wang, Z., & Fan, G. (2019). Manipulating the plastic strain delocalization through ultra-thinned hierarchical design for strength-ductility synergy. *Scripta Materialia*, 172, 165–170.
6. Javaid, F., Pouriaeyali, H., & Durst, K. (2021). Dislocation–grain boundary interactions: recent advances on the underlying mechanisms studied via nanoindentation testing. *Journal of Materials Research*, 36(12), 2545–2557.
7. Golovin, Y.I. (2021) Nanoindentation and mechanical properties of materials at submicro- and nanoscale levels: recent results and achievements. *Physics of Solid State*, 63, 1–41.
8. Ruestes, C. J., Alhafez, I. A., & Urbassek, H. M. (2017). Atomistic studies of nanoindentation—A review of recent advances. *Crystals*, 7(10), 293.
9. Luu, H. T., Dang, S. L., Hoang, T. V., & Gunkelmann, N. (2021). Molecular dynamics simulation of nanoindentation in Al and Fe: On the influence of system characteristics. *Applied Surface Science*, 551, 149221.
10. Ziegenhain, G., Urbassek, H. M., & Hartmaier, A. (2010). Influence of crystal anisotropy on elastic deformation and onset of plasticity in nanoindentation: A simulational study. *Journal of Applied Physics*, 107(6), 061807.
11. Kiely, J., & Houston, J. (1998). Nanomechanical properties of Au (111), (001), and (110) surfaces. *Physical Review B*, 57(19), 12588–12594.
12. Minor, A. M., Syed Asif, S. A., Shan, Z., Stach, E. A., Cyrankowski, E., Wyrobek, T. J., & Warren, O. L. (2006). A new view of the onset of plasticity during the nanoindentation of aluminium. *Nature Materials*, 5(9), 697–702.
13. Han, R. C., Song, H. Y., Li, S., & Guo, T. (2024). Atomistic simulation of nanoindentation behavior of amorphous/crystalline dual-phase high entropy alloys. *Journal of Materials Science and Technology*, 197, 46–56.
14. Qiu, Y., Qi, Y., Zheng, H., He, T., & Feng, M. (2021). Atomistic simulation of nanoindentation response of dual-phase nanocrystalline CoCrFeMnNi high-entropy alloy. *Journal of Applied Physics*, 130(12), 125102.
15. Lv, Z., Mao, Y., Zhang, Q., Liu, Y., & Li, R. (2023). Molecular dynamics analysis on the indentation hardness of nano-twinned nickel. *Materials Today Communications*, 37, 107313.

16. Plimpton, S. (1995). Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1–19.

17. Zhou, X. W., Foster, M. E., & Sills, R. B. (2018). An Fe-Ni-Cr embedded atom method potential for austenitic and ferritic systems. *Journal of Computational Chemistry*, 39(29), 2420–2431.

18. Stukowski, A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012.

19. Honeycutt, J. D., & Andersen, H. C. (1987). Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters. *The Journal of Physical Chemistry*, 91(19), 4950–4963.

Information about the authors

A.V. Korchuganov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the

Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.

D.S. Kryzhevich – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.

A.S. Grigoriev – Junior Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.

O.A. Berezikov – Master's student, Department of Metal Physics, Faculty of Physics, National Research Tomsk State University; laboratory researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.

K.P. Zolnikov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Chief Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 21.02.2025; одобрена после рецензирования 22.04.2025; принята к публикации 05.05.2025.

The article was received by the editorial board on 21 Feb. 2025; approved after reviewing 22 Apr. 2025; accepted for publication 05 May 2025.