

Л.Ю. Козак

Нові погляди на пластичність металів

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти й газу
76000, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15
тел. (03722)42351, E-mail: lub53@ukr.net*

У сучасній фізиці міцності і пластичності у випадку пояснення явища пластичної деформації використовують теорію дислокацій. При цьому вважається, що ідеальна кристалічна ґратка є стійкою і її властивий високий опір деформації зсуву.

У запропонованій статті викладені нові погляди на явище пластичності з використанням уявлень про нестійкість кристалічної ґратки.

Класична модель описує стійкість кристалічної ґратки з умови, що атоми знаходяться у положенні мінімальної потенціальної енергії, не враховуючи їх теплової енергії. У запропонованій моделі для пластичних тіл допускається, що атоми кристалічної ґратки можуть знаходитися у положеннях, що не відповідають мінімуму їх потенціальної енергії, а стійкість, чи нестійкість ґратки залежатиме від кінетичної енергії атомів.

На двовимірній моделі кристала показано, що ідеальна кристалічна ґратка може бути нестійкою відносно зсувної деформації в деяких кристалографічних напрямках. Зсув атомних площин в такій ґратці може здійснюватися за дуже низьких значень зсувних напружень. Опір деформації зсуву, що спостерігається в реальних кристалах, обумовлений густиною дефектів і, перш за все, тонким поверхневим шаром, а в полікристалі - границями зерен і блоків.

Проведено аналіз відомих експериментальних даних для підтвердження запропонованої гіпотези.

Ключові слова: двовимірна модель, пластична деформація, сферично симетричний потенціал, міжатомна взаємодія, кристалічна ґратка, нестійкість.

Стаття поступила до редакції 15.05.2010; прийнята до друку 15.09.2010.

Вступ

Міцність твердих тіл втрачається у випадку досягнення критичних напружень, після чого крихкі тіла руйнуються. На відміну від крихких твердих тіл метали перед руйнуванням пластично деформуються. Особливо пластичними є монокристали чистих металів.

Особливістю пластичної деформації металів є те, що вона відбувається шляхом послідовного зсуву атомних площин у строго визначених кристалографічних напрямках. Процес пластичної деформації супроводжується зміцненням. Крім цього, на відміну від інших твердих тіл, металам властива пластичність за низьких температур.

Перші дослідники, які спостерігали пластичну деформацію металів вважали, що зсув атомів відбувається одночасно. У цьому випадку, теоретично розраховані напруження, які необхідні для зсуву атомної площини, складають величину порядку 10^{10} Па. У реальних матеріалах, особливо в моно-кристалічних металах, у випадку дії зовнішніх сил, кристалічна ґратка досягає значно менших

значень пружної деформації зсуву, після чого деформується вже пластично.

Експериментальні значення межі текучості металів і їх сплавів на два порядки, а для монокристалів високої чистоти і досконалості будови на 3-4 порядки нижчі ніж теоретично розраховані за класичною схемою [1,2] на основі значень модулів пружності. Таким чином, виявлено чітко виражене протиріччя між передбачуваними теорією значеннями міцності кристалів і реальними значеннями.

За різними джерелами [1-3] оцінка значень межі текучості ідеальних кристалів дещо відрізняється, але є близькою до 10^{10} Па. Ця величина піддавалася неодноразовій перевірці. В результаті прийшли до остаточного висновку, що, у випадку врахування інших ймовірних чинників, теоретичний опір зсуву може, в окремих випадках, сягати величини не менше $G/30$ [2]. Але це, все рівно, значно перевищує експериментальні значення міцності чистих металів.

Отже сьогодні фізика міцності і пластичності базується на твердих переконаннях, що для зсуву атомних площин у кристалічній ґратці ідеальної будови необхідні високі напруження (межа

текучості). В основу цих поглядів закладені високі значення модулів пружності матеріалів. Прийнято вважати, що метали високої чистоти і ідеальної будови повинні витримувати значні навантаження.

Невідповідність теоретичних розрахунків реальній міцності металів пояснюють наявністю специфічних дефектів – дислокацій. Вважається, що в реальному кристалі вже присутні дислокації, а наявність атомів, які виведені присутністю дислокацій на гребінь потенціального бар'єру забезпечує пластичне течіння кристала під час дії відносно невеликих зовнішніх напружень. Пересування дислокації забезпечує послідовне поодинокне переміщення атомів, що дає змогу знизити енергетичні затрати на переміщення атомної площини [2]. У випадку дислокаційного механізму пластичної деформації енергія зовнішніх напружень передається послідовно від одного атома до другого. Такий естафетний характер передачі зусилля обумовлює легкість зсуву атомної площини.

Узагальнення поглядів на міцність пластичних твердих тіл відображає відома класична залежність (рис. 1), відповідно до якої вплив дислокацій на



Рис. 1. Залежність опору зсуву від густини дефектів у металах.

міцність металів та їх сплавів відображається U-подібною кривою. Деякій густині дислокацій ρ_m відповідає мінімальний опір деформації монокристалів. Зменшення ρ порівняно з ρ_m приводить до підвищення міцності, оскільки наближає структуру до ідеальної.

Підвищення числа дефектів у порівнянні з ρ_m викликає також підвищення міцності, але вже з іншої причини, а саме - внаслідок підвищення опору переміщення дислокацій. У цій області знаходяться технічні метали і їх сплави.

Історична довідка Основні положення теорії дислокацій були розроблені у 1934 році незалежно Орованам, Тейлором та Полянї і на сьогодні є невід'ємною частиною фізики міцності і пластичності. Але був період, коли ця теорія піддавалась серйозній критиці такими видатними вченими як М. Борн, І.А Одінг, Я.І. Френкель, А.В. Степанов, М.В. Классен-Неклюдова, Т.А. Конторова та ін.

Якщо узагальнити тогочасні критичні зауваження, то в основі їх було спірне питання – чи

може правильна кристалічна ґратка пластично деформуватись у відсутність дислокації, чи ні? Опоненти дислокаційної теорії вважали, що пластичність є властивістю кристалічної ґратки, в той час як її прибічники твердили, що для пластичної деформації необхідні дислокації.

Загалом, опоненти не заперечували наявності дислокацій у кристалі, також допускали, що в процесі кристалізації в реальних кристалах можуть утворюватися як спотворення типу «ноніуса», так і викривлення типу гвинтових дислокацій [4]. Проте, вони заперечували, що дислокації мають особливу властивість рухливості, що істотно відрізняє їх від всіх решти дефектів ґраток. Навпаки, на їх думку дислокації не мають безпосереднього відношення до виникнення пластичного зсуву і що їх наявність є лише перешкодою для поширення пластичної деформації [4]. Тому ними була зроблена спроба створити фізичну теорію пластичності кристалів, перш за все, виходячи з властивостей правильної кристалічної ґратки. Опоненти дислокаційної моделі вважали, що здатність до пластичної текучості є одним з основних властивостей правильної кристалічної ґратки, тоді як, згідно дислокаційної теорії, кристал, що не містить дислокацій, взагалі не виявляє пластичних властивостей [4].

Але теоретичні розрахунки, одержані з класичної схеми [1,2], яка відображає бездислокаційний механізм зсуву, свідчили, що ідеальна ґратка може пластично деформуватись тільки за високих напружень, що суперечить дійсності. Тому уявлення і гіпотези опонентів про пластичність, як властивість кристалічної ґратки, не були прийняті, оскільки не було створено атомної моделі, яка б давала пояснення легкого зсуву однієї атомної площини відносно іншої, так як це можна пояснити на дислокаційній моделі.

Загалом, не дивлячись на критичне ставлення до теорії дислокацій, це не завадило її поширенню і визнанню, оскільки кращої моделі не запропоновано по сьогоднішній день.

I. Нова модель пластичності

Пропонується повернутись до колишніх уявлень щодо пластичності як властивості правильної кристалічної ґратки та спробувати пояснити низький опір зсуву у відсутність дислокацій. Для цього використаємо дещо іншу схему відмінну від класичної схеми, яка є дуже спрощеним відображенням реальних кристалічних тіл. У нашому випадку будемо враховувати сили взаємодії між атомами і їх першими сусідами та другими сусідами, а також тип і геометрію потенціалу міжатомної взаємодії. Крім того, буде враховано вплив теплової енергії ґратки.

На рис. 2 наведено залежність енергії взаємодії, а на рисунку 3а сили взаємодії, між двома атомами в залежності від відстані між ними. У випадку, коли відстань між атомами $r = r_0$ крива потенціальної енергії U проходить через мінімум, глибина якого

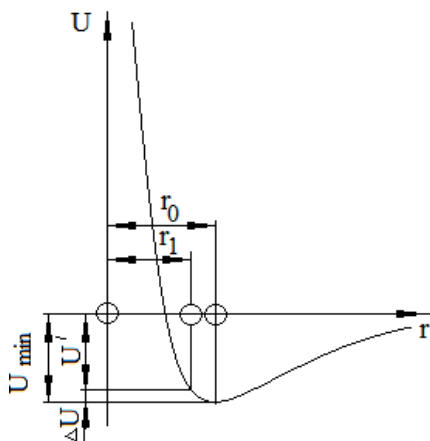
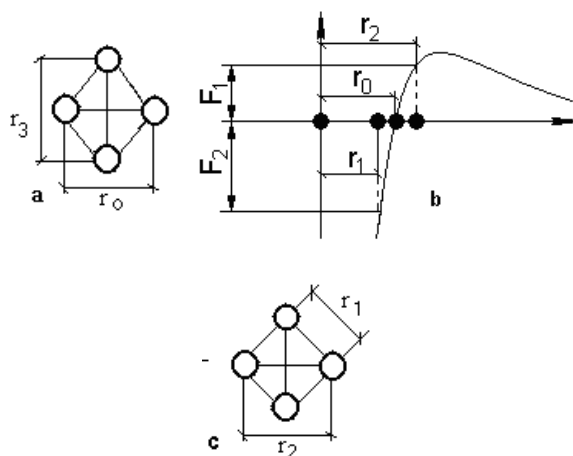


Рис. 2. Залежність енергії взаємодії U між атомами. від відстані r .



F_1 – сила притягання; F_2 – сила відштовхування r_0 – рівноважна відстань; $r_1 < r_0 < r_2$.

Рис. 3. Сили міжатомної взаємодії: а, с – комірки кристалічної ґратки; б – залежність сили взаємодії від міжатомної відстані.

визначає енергію зв'язку двох атомів, а відстань r_0 є рівноважною відстанню, за якої сили відштовхування і сили притягання між атомами урівноважуються (рівні нулю, див. рис. 3а). Під дією сили притягання атоми намагаються максимально зблизитися. Цьому перешкоджають сили відштовхування, які починають з'являтися на малих відстанях і дуже швидко ростуть зі зменшенням цієї відстані. У випадку збільшення відстані між атомами виникають сили притягання. Ці сили спочатку ростуть, але після досягнення максимуму F_{max} при r_{max} , спадають і за відстані, що значно більша r_0 зникають.

Загалом міжатомна взаємодія характеризується трьома параметрами[1]:

1. Радіусом дії r – відстань, на якій сили притягання спадають до нуля ($F < 0, 1F_{max}$). Якщо $r \gg r_0$ сили дальнодіючі, у випадку $r \approx r_0$ – короткодіючі.

2. Характером розподілу електронної щільності валентних електронів у просторі. Якщо цей розподіл електронної щільності є сферично симетричним, тобто ізотропним, тоді сила взаємодії F є функцією відстані r - $F = f(r)$ і зв'язки є ненаправленими.

Кожний атом (іон) намагається оточити себе по можливості більшим числом сусідів – це випадок іонного і металічного типів хімічного зв'язку. Якщо розподіл електронної щільності валентних електронів - анізотропний, тоді в сферичних координатах $F = f(r, j, q)$ і зв'язки мають направлений характер. Число найближчих атомів навколо атома дорівнює числу напрямів, в яких електронна густина максимальна. Це випадок ковалентного зв'язку.

3. Величиною енергії зв'язку. Для $U_0 > 1$ еВ сильний зв'язок і для $U_0 < 1$ слабкий зв'язок.

А тепер розглянемо елемент ґранецентрованої кубічної ґратки (рис.3а), у якому взаємодія атомів відбувається у площині. У нашому випадку для міжатомної взаємодії можна використовувати будь-який відомий потенціал, наприклад, потенціал Ленарда-Джонса. Спочатку розглянемо взаємодію центрального атома з периферійними атомами. Якщо атом 5 розміщений як показано на рис. 3а, то сили взаємодії між центральним атомом і периферійними атомами дорівнює нулю оскільки відстань між ними буде дорівнювати рівноважній відстані r_0 . Відстань між периферійними атомами є більшою за рівноважну $r_3 > r_0$. Тому, щоб між периферійними атомами не виникала сила притягання, потенціал взаємодії між ними повинен бути «втягнутим» так, щоб рівноважна відстань була рівна $r_3 = r_0 \times \sqrt{2}$. Це можливо у випадку, коли потенціал міжатомної взаємодії є анізотропним. Тоді сили міжатомної взаємодії в сферичних координатах $F = f(r, j, q)$ і зв'язки мають направлений характер. У цьому випадку всі атоми знаходяться в положенні рівноваги, а для виведення їх з цього положення необхідно затратити значну енергію (силу) як у класичній схемі [1,2]. Потенціальна енергія центрального атома 5 рівна сумі потенціальних енергій парної взаємодії двох атомів

$$U_5 = U_{15} + U_{25} + U_{35} + U_{45} = 4 U_{min},$$

де $U_{15}; U_{25}; U_{35}; U_{45}$ – потенціальна енергія парної взаємодії атомів атома 5 з атомами 1;2;3;4; U_{min} – величина потенціальної енергії парної взаємодії двох атомів (рис. 2).

А тепер розглянемо випадок, коли потенціал міжатомної взаємодії сферично симетричний – $F = f(r)$. Тоді рівноважна відстань r_0 у всіх напрямках однакова – це випадок ненаправленого зв'язку. Якщо атоми залишити у положенні як показано на рис. 3а, то між центральним і периферійними атомами сила міжатомної взаємодії дорівнюватиме нулю. А між периферійними атомами виникне сила притягання, оскільки відстань між ними більша рівноважної – $r_3 > r_0$. Тоді для встановлення рівноваги периферійні атоми зблизяться один до одного до відстані r_2 і одночасно до центрального атома на – r_1 , так щоб сили відштовхування $\sum F_1$ між центральним і периферійними атомами урівноважили сили притягання між периферійними атомами $\sum F_2$ (рис. 3а). Внаслідок цього відстань між атомами зменшиться і стане $r_1 < r_0 < r_2$ (рис. 3в). Елемент з п'яти атомів стиснеться. У цьому випадку (рис. 2) потенціальна енергія центрального атома буде рівна

$$U'_5 = U'_{15} + U'_{25} + U'_{35} + U'_{45} = 4 U' = 4 U_{min} - 4\Delta U,$$

де U' – енергія парної взаємодії атома 5 після зміщення до відстані r_1 (рис. 2);

ΔU – підвищення потенціальної енергії атома 5 після зміщення з рівноважного положення.

Отже потенціальна енергія центрального атома підвищиться на величину $4\Delta U$ порівняно з тим, коли крайні атоми були віддалені від нього на рівноважну відстань r_0 . За таких обставин можна очікувати, що центральний атом буде намагатись переміститись у таке положення, де його потенціальна енергія буде мінімальною.

На рис. 4а наведена модель багатоатомного

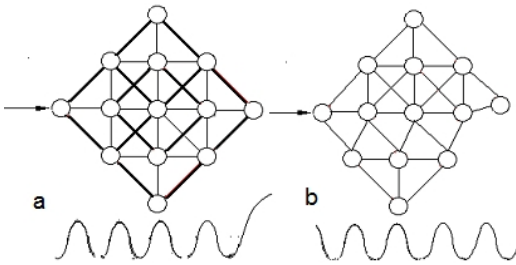


Рис. 4. Двохмірна кристалічна ґратка.

двохвимірному кристала. Кожний внутрішній атом має навколо себе найближчих чотири сусіди, які знаходяться на відстані менше $r_1 < r_0$, через це його потенціальна енергія дещо вища, ніж коли б він знаходився на відстані r_0 . Тому всі внутрішні атоми знаходяться у нестійкому положенні. Що стосується приповерхневих атомів то, через відсутність сусідів зі сторони поверхні, їх положення та відстань між ними буде дещо іншою ніж у внутрішніх атомів. Очевидно, що це стосується також і їх потенціальної енергії. Можна вважати, що у приповерхневому шарі товщиною у декілька атомів останні знаходяться у положеннях з мінімальною потенціальною енергією тому їх положення є стійким.

Зближення атомів є характерним і для трьохвимірної ґратки з тією різницею, що внутрішні атоми взаємодіють з більшим числом сусідів, відповідно стискання кристалічної ґратки є більшим. Слід також врахувати, що атомна взаємодія в реальних кристалах не обмежується другими сусідами атома, що додатково впливатиме на зближення атомів. Ефект зближення атомів до відстаней, що менші рівноважної за нормальних умов згадується в роботах [5-7].

У випадку дії зовнішньої сили на кристал (рис. 4а) одиночне зміщення атома в положення з мінімальною енергією неможливе, оскільки йому заважають сусіди. А ось одночасне зміщення всіх атомів в заданому напрямі можливе (рис. 4б). Якщо прикласти незначне зусилля, весь ряд атомів зміститься в нове положення, де потенціальна енергія атомів (крім поверхневих) нижча [8]. Під час такого зсуву енергія затрачається тільки для переміщення поверхневого атома, оскільки його потенціальна енергія зростає. Таким чином за наведеною вище схемою для одночасного зсуву всіх атомів площини необхідна енергія є набагато менша ніж у випадку

класичної схеми [1,2].

Одночасне переміщення внутрішніх атомів кристала за деякими кристалографічними напрямками у положення з нижчою потенціальною енергією під дією зовнішнього зусилля це і є пластична деформація. Опір пружній деформації кристалічної ґратки, тобто її стійкість, втрачається за деякого критичного напруження, яке є значно нижче теоретичної міцності цієї ґратки, що одержана з класичної схеми. Втрата пружної стійкості сприяє перебудові ґратки кристала, в результаті чого вся система переходить в більш рівноважний стан.

Пластична деформація є характерною для кристалічних твердих тіл, атоми яких мають специфічний потенціал міжатомної взаємодії. У таких кристалах внутрішні атоми знаходяться в нестійких положеннях, а їх групове переміщення у нове більш стійке положення відбувається внаслідок дії зовнішніх сил.

На рис. 5 наведено напрями зсуву у двовимірній

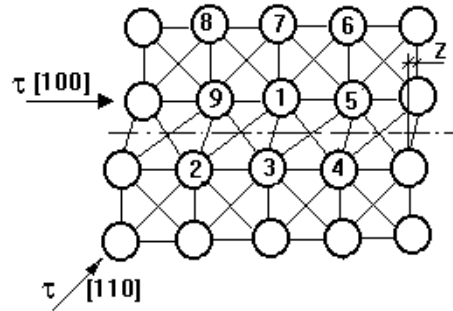


Рис. 5. Зсув атомної площини.

ґратці, а на рисунку 6 – залежності [9] зміни енергії атома у випадку зсуву атомних площин для двохвимірної ґратки у напрямках [100] і [110]. У розрахунках використано довільний потенціал міжатомної взаємодії. Відповідно до отриманих графіків енергія для зміщення атома 1 разом з атомами площини у кристалографічному напрямі [100] (крива-1) знижується, а в напрямі [110] (крива-2) підвищується. Зниження енергії у випадку зміщення атомних площин у напрямі [100] свідчить про нестійкість кристалічної ґратки безмежних розмірів відносно зсувних деформацій. Про нестійкість кристалічних ґраток згадується в роботах М. Борна [10,11].

Нестійка ґратка за відповідних умов може перетворюватись у стійку. З підвищенням температури зростає кінетична енергія атомів і відстань між ними збільшується за рахунок внутрішнього тиску [3,18]. За деякої температури збільшення відстані між центральним і крайніми атомами може досягти рівноважної відстані r_0 . Внаслідок цього потенціальна енергія центрального атома знизиться і знову досягне мінімуму. Таким чином за деякої температури атоми мають мінімальну потенціальну енергію, оскільки знаходяться на відстані r_0 , а в міру того, як атоми втрачають кінетичну енергію (зниження температури), вони зближаються до відстані меншої за r_0 і їх потенціальна енергія підвищується [12]. В результаті

кристалічна ґратка перетворюється в нестійку.

Для деяких металів і сплавів зміна температури призводить до поліморфних перетворень. Кристалічна ґратка за температур близьких до температури поліморфного перетворення стає нестійкою. Прикладення зовнішніх сил у цьому випадку викликає надпластичність – трансформаційну надпластичність. Явище надпластичності, що має місце під час поліморфних перетворень, пояснюють нестійкістю кристалічної ґратки [13]. Це явище є аналогічним до описаного вище.

Початкове розміщення атомів в обох випадках залежить від значення r_0 , яке обумовлює їх положення у просторі в точках, де сумарна потенціальна енергія атомів мінімальна. Зміна електронної структури твердого тіла викликає зміну величини r_0 , в наслідок чого точки з мінімальною енергією зміщаються в нові положення, у які перемістяться атоми, щоб енергія нової кристалічної ґратки була мінімальна.

У нашому випадку вважається, що при зміщенні атомів і зміні температури потенціал міжатомної взаємодії не змінюється, тобто рівноважна відстань r_0 є постійною величиною. Але зі зміною температури внаслідок дії внутрішнього тиску відбувається зміщення атомів, в результаті чого змінюється у просторі положення точок з мінімальною потенціальною енергією. У випадку дії зовнішніх сил атоми переміщуються у ці положення, де їх потенціальна енергія буде мінімальною.

Запропонована модель кристалічної ґратки нестійка відносно зсувних деформацій у напрямі густозаселеному атомами, в той же час, зберігає високу стійкість у інших напрямках. Тому у таких тілах зсув атомних площин в ідеальній ґратці за деякими кристалографічними напрямками може здійснюватися за дуже низьких значень зсувних напружень або у відсутності їх. Але нестійкість кристалічної ґратки (відсутність опору зсуву) характерна у випадку її безмежних розмірів, коли число частинок нескінченне. В цьому випадку можна визначити можливі періодичні структури (тобто елементарну комірку ідеального кристала). Якщо ж число атомів кінцеве, то ідеальна кристалічна ґратка займатиме деякий об'єм в просторі, при цьому періодичне розташування атомів вже неможливе. У приповерхневому шарі атоми будуть розташовані менш щільно, ніж в глибині тіла. Кристал обмежених розмірів є стійким відносно зсувних деформацій, оскільки нестійкість є характерною тільки для внутрішніх областей з ідеальною ґраткою у той час, як приповерхневі шари, в силу їх специфічної будови, будуть стійкими і утримуватимуть внутрішні атомні площини від зсуву. Такий кристал слід розглядати як двохфазну систему [14] зі стійкою фазою – приповерхневі шари, дефекти будови, границі зерен (у полікристалів) і нестійкою фазою – внутрішні області кристала досконалої будови. Міцність такого кристалу буде залежати від співвідношення фаз.



Рис. 6. Залежність зміни потенціальної енергії атома 1 від зсуву z атомних площин у напрямі [100] – 1, і у [110] – 2.

II. Обговорення

Загалом, запропонована вище модель – це повернення до попередньої ідеї, коли пластичність розглядали як властивість бездефектної кристалічної ґратки. На основі цієї моделі на атомному рівні показано, що зсув атомних площин у ідеальній кристалічній ґратці може відбуватись за напружень значно нижчих від теоретично розрахованих.

Свого часу, найближче до вирішення цього питання підійшов академік А.В. Степанов. Згідно його уявлень, втрата пружної стійкості кристалічної ґратки має місце за деякого критичного напруження, яке є нижче теоретичної міцності цієї ґратки. Втрата пружної стійкості сприяє перебудові ґратки кристала, в результаті чого вся система переходить в більш рівноважний стан [4].

Відповідно запропонованої моделі ідеальна кристалічна ґратка пластичних твердих тіл втрачає стійкість у випадку дії малих деформацій у деяких кристалографічних напрямках. Властивість такої кристалічної ґратки пластично деформуватись обумовлена нестійкістю, оскільки її атоми знаходяться у положеннях з дещо вищою потенціальною енергією. А елементарний акт пластичної деформації – це одночасний зсув всіх атомів площини у положення з нижчою потенціальною енергією.

Згідно дислокаційної теорії пластична деформація в металічних кристалах обумовлена присутністю значної кількості дислокацій (мережа дислокацій). Через це велика кількість атомів знаходиться у нерівноважному положенні з дещо вищою потенціальною енергією. Переміщення їх в положення з нижчою енергією і є пластична деформація. Майже як за запропонованою моделлю. Але у запропонованій моделі мова йде про глобальну нестійкість а у дислокаційній моделі – про локальну нестійкість. Спільним також для цих двох моделей є трактування правої вітки класичної U-подібної кривої залежності міцності від густини дефектів (рис.1), де показано, що за зростання густини дислокацій підвищується міцність і знижується пластичність. Але по при подібність цих моделей, звичайно ж, є відмінності.

Дислокаційна модель виключає можливість пластичної деформації в ідеальному кристалі у відсутність дефектів. Тому для зсуву атомних площин в ідеальній кристалічній ґратці необхідні дуже високі напруження. У запропонованій моделі для твердих тіл з сферично симетричним потенціалом міжатомної взаємодії пластична деформація відбувається у відсутність дислокацій за низьких напружень і є властивістю кристалічної ґратки. Що стосується кристалічної ґратки з направленими зв'язками (анізотропний потенціал міжатомної взаємодії), то вона є характерною для твердих тіл з низькою пластичністю з ковалентним типом хімічного зв'язку. Присутність дислокацій у ковалентних кристалах не забезпечує їм пластичність через те, що їх кристалічна ґратка стійка. А та незначна кількість атомів, які знаходяться у нестійкому положенні завдяки наявності мережі дислокацій, не в змозі забезпечити достатньої пластичності таким кристалом, тому вони малопластичні і крихкі.

Що стосується експериментальних підтверджень нестійкості ідеальної ґратки металів, то є значна кількість даних з дослідження масивних металічних монокристалів, які свідчать про надзвичайно низькі значення їх межі текучості (низький опір зсуву атомних площин). З узагальнення експериментальних досліджень [15-18] слідує, що з підвищенням чистоти і досконалості будови металічних монокристалів спостерігається зменшення їх межі текучості, мінімальних значень якої не встановлено і, загалом, є всі підстави вважати, що межа текучості може бути близькою до нуля.

За дислокаційною моделлю зменшення кількості дислокацій у технічних металах спочатку знижує межу текучості (див. класичну криву міцності рис.1), а з подальшим підвищенням чистоти і досконалості будови металічних монокристалів їх міцність має зростати. Але в реальності, як відмічено вище, з підвищенням чистоти і досконалості будови металічних монокристалів їх міцність падає, а не зростає. Тому нижня межа міцності для металічних макромонокристалів, яка б мала спостерігатись відповідно до класичної кривої (рис.1), не виявлена.

Загалом, низьку міцність металічних макромонокристалів пояснюють недостатньо правильною їх будовою і присутністю дислокацій, які проблематично усунути у великих за розмірами монокристалах. А як підтвердження високої міцності ідеальної кристалічної ґратки наводять приклад «вусів».

Дослідження механічних властивостей «вусів» вважається основним експериментальним підтвердженням високої міцності (межі текучості) ідеальної кристалічної ґратки металів і його можна розглядати як основне заперечення запропонованої гіпотези.

В той же час, слід взяти до уваги, що мікромонокристали («вуса») мають поверхню, яку слід розглядати як дефект. Будова приповерхневих шарів відмінна від будови ідеальної кристалічної

ґратки. Ідеальною може бути будова кристалічної ґратки у кристалів безмежних розмірів. Тонкі «вуса» не можна вважати більш досконалими за будовою ніж товсті монокристали, оскільки поверхня у перших складає більшу частину у загальному їх об'ємі ніж у других. Через надзвичайно малі розміри тонких «вусів» на їх міцність значний вплив має поверхня [3,20-24]. У випадку збільшення поперечного розміру «вусів», їх міцність (межа текучості) падає (рис. 7). Дуже міцними є «вуса»

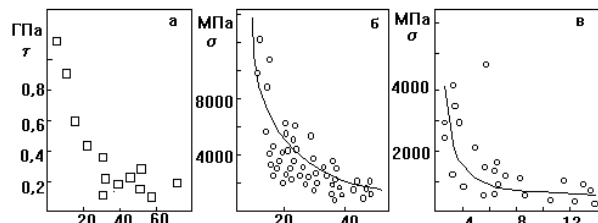


Рис. 7. Експериментальні залежності: міцності кристалів заліза а і міді б [21]; в – напружень зсуву від діаметру монокристалів заліза а [22].

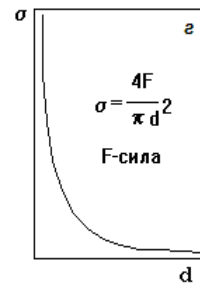


Рис. 8. Теоретична залежність міцності кристалів від їх діаметру d.

малого діаметра (менше 5 мкм). Зі збільшенням діаметра «вусів» їх міцність знижується і за розмірів більше 50 мкм міцність співрозмірна з міцністю звичайних металів. Подібне спостерігається для полікристалічних металів зі зростанням діаметра зерен їх міцність (межа текучості) падає - залежність Петча-Холла.

Експериментальні дані, що наведені на рис. 7 можна пояснити наступним чином. Мала частка приповерхневих шарів у повному об'ємі масивних металічних монокристалів обумовлює мізерний вплив поверхні на їх міцність, тому вони мають низькі значення межі текучості. Відповідно до запропонованої моделі у реальному металічному монокристалі внутрішні області не створюють опору зсувним деформаціям, а лише приповерхневі шари. Тому, незалежно від товщини кристала, пластична деформація буде починатись після втрати міцності поверхневих шарів під дією приблизно постійної сили, а напруження знижатимуться зі збільшенням поперечного перерізу (діаметра) кристала (див. теоретично побудовану криву на рис. 8). Отже, відповідно нашим припущенням, у випадку збільшення діаметра вусів повинна зменшуватись межа текучості «вусів», що і підтверджується експериментальними даними.

Крім того, відповідно до згаданого вище, у міру того як металічний монокристал буде

деформуватись, його міцність буде зростати. Це стосується й «вусів», тому деформовані «вуса» повинні мати вищу міцність ніж недеформовані, за умови, що під час деформації на їх поверхні не виникатимуть мікротріщини або інші концентратори напружень. Це підтверджують експериментальні дані [25] відповідно до яких, під час деформації мідного «вуса» було досягнуте значне зміцнення, яке за величиною близьке до теоретичної міцності. Міцність цього «вуса» після пластичної деформації перевищувала межу течіння недеформованого більш тонкого «вуса» (рис. 9), хоча межа текучості більш

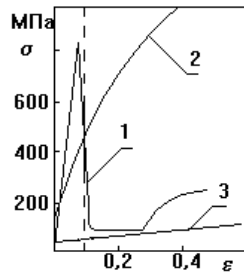


Рис. 9. Діаграма розтягу моно-кристалів міді [17]: 1 – тонкий вус, 2 – товстий вус, 3 – масивний монокристал.

товстого «вуса» була нижчою.

Під час механічних досліджень було встановлено [26], що пластично деформовані ниткоподібні кристали $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ з полісинтетичними двійниками мають найбільш високу міцність, яка сягає для стрічок січенням $0,1\text{-}1\ \mu\text{м}^2$ до 15 ГПа. Міцність недеформованих стрічок того ж січення складала 5 – 10 ГПа.

Висока міцність характерна також для голчатих скалок (їх називають «тріски» або «вуса» розколу з дуже високою густиною дислокацій до $10^9\ \text{см}^{-3}$), які утворюються під час розколу кристалів. За товщини у кілька мікронів їх пружні властивості відповідають ниткоподібним кристалам [26].

Слід згадати про високу міцність інших ниткоподібних утворень – ниткоподібних кристалів суміші металів, (Cu-Fe, Cu-Ni, Fe-Co та ін.), які можуть бути названі так лише умовно, оскільки не є монокристалами і мають складну будову. Їх висока міцність обумовлена присутністю великої кількості дефектів і має характер дисперсного зміцнення [26].

На сьогоднішній день показано, що в ниткоподібних кристалах можуть бути присутні дислокації у великій кількості, але міцність їх залишається високою. В роботі [26] згадується, що ниткоподібні кристали з одною, або двома осьовими дислокаціями витримували деформацію від 0,2 до 10%.

Перераховані експериментальні факти не вписуються у сучасні уявлення фізики міцності та пластичності і їх пояснення з точки зору теорії дислокацій проблематично. Зате з точки зору запропонованої гіпотези, вони мають просте пояснення.

Міцність і пластичність чистих металів залежить, в основному, від співвідношення між об'ємом

областей з правильною ґраткою і дефектних областей (співвідношенням двох фаз) [27]. Для дефектних областей характерна підвищена міцність і крихкість, а для бездефектних – пластичність і низька міцність. При цьому, ці властивості матеріалу у макроскопічному об'ємі визначаються не тільки (і не стільки) сумою часток у цьому об'ємі бездефектних чи дефектних областей, значно суттєвішим тут є ступінь дисперсності, частота і рівномірність таких областей [27]. Остання умова найкраще задовольняється для дрібнозернистої (дрібноблочної), коміркової структури металу. Саме така структура забезпечує високу міцність високочистим металом після їх термомеханічної обробки.

Загалом, відповідно до запропонованої моделі, за аналогією до класичної кривої міцності (рис. 1), побудуємо нову залежність міцності металів у залежності від кількості дефектів (рис. 10). Тут

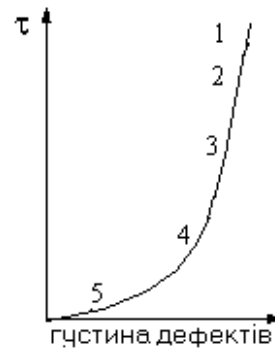


Рис. 10. Вплив структури на міцність: 1 – деформованих тонких кристалів і волокон, 2 – «вусів», 3,4 – технічних металів і їх сплавів, 5 – масивних монокристалів.

деформовані мікрочастинки мають найвищу міцність – т.1-2, оскільки їх кристалічна ґратка найбільш деформована. Сюди ж можна віднести тонкі скляні волокна, міцність яких сягає 5 ГПа, тому що через їх аморфність у них взагалі відсутня кристалічна ґратка. Що стосується недеформованих тонких «вусів», то вони дещо поступаються міцністю деформованим вусам, але міцність їх зменшується зі збільшенням діаметру - т. 2-3, що обумовлено впливом поверхні, яка є двовимірним дефектом. Положення 3-4 на кривій міцності займають високоміцні технічні метали та їх сплави. Чисті полікристалічні метали, через наявність у них границь зерен і блоків, а також інших дефектів (вакансій включень дислокацій) займають проміжне положення на кривій міцності – т. 4-5. При цьому їх міцність знижується зі збільшенням розмірів зерен та блоків (відома залежність Петча-Холла) і зменшенням кількості дефектів. Масивні металічні монокристали високої чистоти і досконалої будови мають найнижчу межу текучості (від т. 5 до нуля), оскільки їх будова близька до будови ідеальної кристалічної ґратки, а вплив поверхні при їх значних розмірах є несуттєвим.

III. Металічна пластичність як стан речовини

Відомо, що пластичність і електропровідність є характерними властивостями металів, що відрізняє їх від інших твердих тіл, особливо, від діелектриків, які є дуже крихкими за низьких температур. Напівпровідникові матеріали здебільшого також непластичні. Відомо також, що у випадку зміцнення металів внаслідок механічної обробки знижується їх пластичність і падає електропровідність. З іншого боку, всяке тверде тіло перебуваючи під достатньо високим гідростатичним тиском набуває основні властивості металів - пластичність і електропровідність [15, 28-30]. Все це є свідченням того, що пластичність і електропровідність пов'язані між собою. Про існування зв'язку між пластичністю і електропровідністю, свого часу, згадував Френкель [18].

Існування зв'язку між зовсім різними явищами - пластичністю і електропровідністю обумовлено додатковим зближенням атомів кристалічної ґратки внаслідок дії гідростатичного тиску у всіх твердих тілах, а в металах – за рахунок сил притягання між атомами і їх дальніми сусідами. За відповідного зближення атомів всі тверді тіла стають пластичними і електропровідними. Однак, природа цих явищ різна. Електропровідність є наслідком перекриття зони валентних електронів із зоною провідності, а пластичність - наслідком перетворення стійкої ґратки у нестійку.

Додаткове зближення атомів у випадку впливу зовнішніх сил (гідростатичного тиску) є причиною пластичності і електропровідності твердих тіл з неметалічним типом хімічного зв'язку. У відсутність зовнішніх сил вони втрачають ці властивості. У металах атоми додатково зближені внаслідок специфіки їх міжатомної взаємодії, тому пластичність і електропровідність є їх характерними властивостями. Але під дією зовнішніх чинників – температури і тиску метали можуть втрачати ці властивості. Так, наприклад, для олова за температури $-13,3^{\circ}\text{C}$ спостерігається поліморфне α - β перетворення зі зміною металічного зв'язку у ковалентний, при цьому олово з пластичного перетворюється у крихке. А класичний напівпровідник, яким є германій, під тиском 1500 МПа і кімнатній температурі стає звичайним металом, у результаті чого підвищується його пластичність і електропровідність. Таким чином, оскільки характерні властивості металів – пластичність і електропровідність тверді тіла можуть набувати під дією зовнішніх чинників, то можна говорити про металічний стан речовини.

Слід також зауважити, що наявність електропровідності у металів можна розглядати як додатковий доказ стискання (зближення атомів) кристалічної ґратки.

Загальновідомо, що схильність тих чи інших тіл пластично деформуватися залежить від типу хімічного зв'язку. Про взаємозв'язок між

пластичністю і типом хімічного зв'язку йдеться у конфігураційній моделі твердих тіл [31]. Відповідно до цієї моделі вважається, що у конденсованому стані речовин можливо співіснування двох підсистем валентних електронів – частково локалізованих і колективізованих, що визначає міцність і пластичність речовин. Академік Б.І. Архаров з співробітниками [27] на основі цієї моделі прийшли до висновку, що у металах можливе співіснування областей з високим ступенем делокалізації валентних електронів (області правильної будови кристалічної ґратки), для яких характерним є металічний зв'язок, і областей де валентні електрони більш локалізовані (дефектні області матеріалу), для яких характерний ковалентний зв'язок. Відповідно у металі є області більш пластичні і менш пластичні (дві фази).

У запропонованій моделі нестійкість кристалічної ґратки викликана додатковим зближенням атомів, що сприяє делокалізації електронного газу і такі речовини є пластичними. Руйнування кристалічної ґратки і збільшення міжатомної відстані під час пластичної деформації [32-35] сприяє локалізації електронного газу і утворюються ковалентні зв'язки, про що свідчить часткова втрата електропровідності (росте електричний опір [36-38]). Локалізації електронного газу з точки зору конфігураційної моделі обумовлює зниження пластичності, тобто підвищується стійкість кристалічної ґратки.

Таким чином запропонована гіпотеза наводить «місток» між поясненням природи пластичності, що базується на впливі дефектів кристалічної ґратки, і поясненням пластичності з точки зору електронної структури твердих тіл та типу хімічного зв'язку.

Висновки

1. У залежності від характеру розподілу електронної густини валентних електронів формується геометрія потенціалу міжатомної взаємодії. Атоми зі сферично симетричними потенціалами міжатомної взаємодії утворюють нестійку кристалічну ґратку, а у випадку асиметричного потенціалу міжатомної взаємодії з направленими зв'язками – утворюють стійку ґратку.

2. Причиною нестійкості кристалічної ґратки є укорочення міжатомної відстані порівняно з рівноважною (стискання кристалічної ґратки) за рахунок сил притягання між атомами і їх другими сусідами, які урівноважується силами відштовхування між атомами і їх першими сусідами. Це явище є характерним для металів, які, у наслідок додаткового стискання кристалічної ґратки, стають електро-провідними і пластичними.

3. Пластичність і міцність твердих тіл з ідеальною кристалічною ґраткою залежить від її стану. Тверді тіла з нестійкою кристалічною ґраткою, для якої властивим є відсутність опору відносно малих зсувних деформацій у деяких кристалографічних напрямках, є пластичними і неміцними. Тверді тіла зі стійкою ґраткою –

високоміцні і непластичні.

4. Пластична деформація – це одночасне зміщення атомів у нестійкій ідеальній кристалічній ґратці з положення нестійкої рівноваги у положення стійкої рівноваги. Зміщення атомних площин відбувається у кристалографічних напрямках найбільш заселених атомами, при цьому опір зсуву атомних площин відсутній, або незначний. Існування у реальних металах дефектів (поверхневих шарів, границь блоків і зерен, дислокацій, вакансій і т.і.) підвищує опір зсуву атомних площин, що забезпечує їм міцність.

5. В залежності від зовнішніх умов – температури

та гідростатичного тиску, стан кристалічної ґратки може змінюватися зі стійкого у нестійкий і навпаки.

Таким чином тип хімічного зв'язку є основним чинником, який визначає пластичність і міцність ідеальної кристалічної ґратки.

Структурний чинник визначає пластичність і міцність технічних металів та їх сплавів, будова яких через присутність різного роду дефектів, границь блоків та зерен і поверхневих шарів значно відрізняється від будови ідеальної кристалічної ґратки.

- [1] П.И. Полухин, С.С. Горелик, В.К. Воронцов *Физические основы пластической деформации. Учебное пособие для вузов.* Металлургия, М. 584 с. (1982).
- [2] М.В. Белоус, М.П. Браун. *Физика металлов.* Вища школа, К.343 с. (1986).
- [3] С.А. Котречко, Ю.Я. Мешков. *Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции.* Наукова думка. Київ. 295 с. (2008).
- [4] М.В. Класен-Неклюдова и Т.А. Конторова. *По поводу дислокационной гипотезы пластичности. Успехи физических наук* Т.11, вып.1, 1954 с. 142-151
- [5] Я.Й. Дутчак та ін. *Фізика металів.* Київ.: НМК ВО, 162 с. (1993).
- [6] У. Пирсон. *Кристаллохимия и физика металлов и сплавов.* Мир, М. 419с. (1977).
- [7] Р. Кан. *Физическое металловедение,* Мир, ч.П.-М. 583с. (1970).
- [8] Л.Ю. Козак Комп'ютерне моделювання зсуву атомної площини у двовимірній кристалічній ґратці // *Фізико-хімічна механіка матеріалів,* (1), сс.114-115 (1999).
- [9] Л.Ю. Козак. *Пластичність металів і нестійкість кристалічної ґратки,* Факел. Івано-Франківськ. 146 с. (2004).
- [10] M. Born. On the stability of crystal lattices // *Proc. Camb. Phil. Soc.* 36, p.160-172. 1940
- [11] M. Born. On the stability of crystal lattices // *Proc. Camb. Phil.Soc.* 38, pp. 82-99 (1942).
- [12] Л.Ю. Козак. Комп'ютерне моделювання впливу температури на стійкість двовимірної кристалічної ґратки // *ФХММ,* 6, сс.119-120 (1999).
- [13] В.А. Калинин, И.С. Томашевская. О пластичности минералов при фазовых переходах // *Доклады АН СССР.* 268, 39-44 (1983).
- [14] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Предел текучести и пластическая деформация нано-кристаллических материалов // *Март,* <http://www.ipme.ru/labs/ltdm/ovidko.htm> (2003).
- [15] В.И. Лихтман, П.А. Ребиндер, Г.В. Карпенко. *Влияние поверхностно-активной среды на процессы деформации металлов.* Из-во АН СССР, М. 204 с. (1954)
- [16] Л.И. Миркин. *Физические основы прочности и пластичности.* МГУ, М. 537 с. (1968).
- [17] Е. Шмидт, В. Боас. *Пластичность кристаллов в особенности металлических.* Л.-М. 298 с. (1938).
- [18] Я.И. Френкель. *Введение в теорию металлов.* Ленинград, Наука, 423 с. (1972).
- [19] Z. Wojarski, Z. Wokulski. *Badania wiskerow zelaza w statycznej probie rozciagania* // *Arch. hutn.,* 1, pp.3-26. (1980).
- [20] М.И. Гольдштейн, В.С. Литвинов, Б.М. Бронфин. *Металлофизика высокопрочных сплавов.* Металлургия, М.389 . 1986.
- [21] Г.П. Черепанов. К общей теории разрушения // *ФХММ,* (1), сс. 36-44 (1986).
- [22] В.П. Алехин. *Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов.* Наука, М. 280 с. (1988).
- [23] В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.И. Томашевский. *Кинетическая природа прочности твердых тел.*
- [24] Г. Глейтер, Б. Чалмерс. *Большееугольные границы зерен.* Мир, М. 314 с. (1975).
- [25] С.З. Бокштейн и др. Особенности упрочнения металлических и неметаллических нитевидных монокристаллов // *В сб.: Физика деформационного упрочнения монокристаллов* Наукова думка, Киев. 267 с. (1972).
- [26] Г.В. Бережкова. *Нитевидные кристаллы* Наука, М. 157 с. (1969).
- [27] Б.И. Архаров, Ю.Г. Скрипка, Е.С. Мархасин. О значении механизма формирования межатомных связей в сплавах для их прочностных и пластических свойств // *ФХММ,* (2), сс. 47-50 (1978).
- [28] *Механические свойства материалов под высоким давлением.* Под редакцией Х. Пью. Мир, М. 295 с. (1973).

- [29] Б.И. Береснев. *Пластичность и прочность твердых тел при высоких давлениях*. Наука, М. 274 с. (1970).
- [30] Л.В. Бриджмен. *Исследование больших пластических деформаций и разрыва*. 356с. (1955).
- [31] Г.В. Самсонов, И.Ф. Прядко, Л.Ф. Прядко Конфигурационная модель вещества. Наукова думка, К. 316 с. (1975).
- [32] Г.В. Карпенко. *Про фізико-хімічну механіку металів*. Наукова думка, К. 175 с. (1973).
- [33] Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела*. Наука, М. 791 с. (1978).
- [34] О.Г. Рыбакина, Я.С. Сидорин. Экспериментальное исследование закономерностей пластического разрыхления металлов // *Механика твердого тела. Изв. АН СССР*: (1), сс. 120-124 (1966).
- [35] В.А. Колмогоров, А.А. Богатов, Б.А. Мигачев, и др. *Пластичность и разрушение*. Металлургия, М. 335 с. (1977).
- [36] Р. Хоникомб Пластическая деформация металлов. -М: Мир, 1972.-407с.
- [37] Л.И. Миркин. *Физические основы прочности и пластичности*. МГУ. М. 537 с. (1968).
- [38] В.Г. Рыжиков, О.А. Троицкий и др. Электропластическое волочение проволоки из нержавеющей стали. / *Тезисы докладов 7 всесоюзного симпозиума по механоэмиссии и механохимии твердых тел. Ташкент*, 156 с. (1979).

L. Yu. Kozak

New Views on the Metals Plasticity

*Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,
15, Karpatska Str., 76000, Ivano-Frankivsk,
tel.: 03422-42351, E-mail: kozakl@ifdtung.if.ua*

In modern physics of strength and plasticity the theory of dislocations is used when explaining the plastic deformation phenomenon. In this case the ideal crystal lattice is supposed to have a high shear deformation resistance (high stability).

New considerations on the phenomenon of plasticity, using the ideas about unstable crystal lattice. On the two-dimensional model of the crystal it was showed, that the crystal lattice can be unstable under influence of small shear deformation in specific conditions. According to it a perfect crystal lattice of plastic solids is unstable relatively to small shear deformations along some crystallographic directions. Therefore the atomic planes shear in such a perfect lattice can occur at very low values of shear stresses. The resistance to shear deformation, observed in real crystals, is caused by the existing defects and, first of all, of a thin surface layer, while in polycrystals – by the boundaries of grains and blocks.

Key words: plasticity, distributions, crystal, atoms, defects.