

УДК 541.183

Л. Козак

Дослідження стійкості двохвимірної кристалічної ґратки

*Івано-Франківський державний технічний університет нафти і газу
вул. Карпатська 15, м. Івано-Франківськ, 76000,
Tel. 03422-42351, fax 03422-42139, E-mail: kozakl@ifdtung.if.ua*

У даній статті на двохмірній моделі показано, що кристалічна ґратка у відповідних умовах може бути нестійкою відносно малих зсувних деформацій. Причиною нестійкості є, перше, геометрія потенціалу міжатомної взаємодії, друге, величина енергії коливань (теплова енергія) атомів. У випадку сферичної симетрії потенціалу міжатомної взаємодії кристалічної ґратки, між атомами і їх ближчими сусідами діють сили відштовхування, які врівноважуються силами притягання, що діють між атомами і їх дальніми сусідами. Така ґратка є нестійкою і при дії зовнішніх зусиль атоми ґратки переміщуються у нові, більш стійкі положення, у результаті чого відбувається зсув атомних площин.

Ключові слова: Трьохатомна модель, кристалічна, аморфна, структура, потенціал, міжатомна взаємодія, твердіння, стійкість, сферично-симетричний потенціал.

Стаття поступила до редакції 9.11.2000; прийнята до друку 20.03.2001

У роботі [1] на трьохатомній лінійній моделі твердого тіла було показано, що вона може бути нестійкою у випадку взаємодії крайніх атомів між собою. Якщо ж розглянути цю модель у площині, то нестійка лінійна модель намагатиметься змінити свою форму і перетвориться у рівносторонній трикутник (рис. 1, а), у

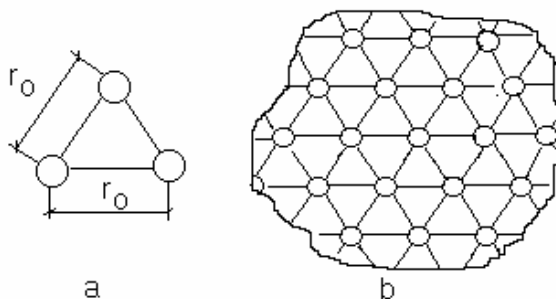
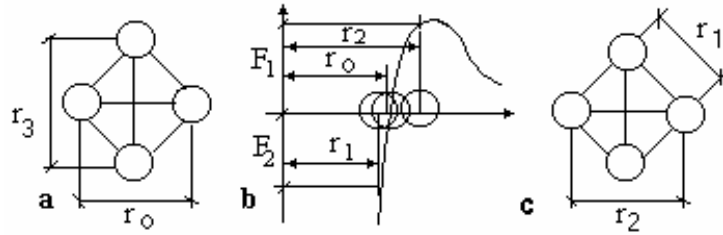


Рис. 1. Трьохатомна модель твердого тіла і двохвірна кристалічна ґратка.

якому відстань між атомами буде r_0 , а сили взаємодії рівні нулю. Положення, яке займають атоми є стійким, а сама модель є

елементарною коміркою двохвірної ґратки (рис. 1, б). Така ґратка є стійкою до дії малих зсувних деформацій, оскільки зміщення атома з його положення викликати протидіючу силу. Але все це справедливо у випадку, коли взаємодія між атомами поширюється на найближчих сусідів.

Якщо допустити, що міжатомна взаємодія поширюється на відстань $2r_0$, а потенціал міжатомної взаємодії є сферично симетричним, то між атомами і їх дальніми сусідами виникнуть сили притягання (рис. 2), оскільки відстань між цими атомами рівна $r_3 > r_0$. За рахунок цих сил атоми зближатимуться доки ці сили скомпенсуються силами відштовхування, які виникнуть у цьому випадку, між атомами та їх ближніми сусідами. Якщо при цьому, потенціал міжатомної взаємодії буде симетричним, то трикутна (гексагональна) ґратка перетвориться у квадратну, параметр якої r_1 є меншим ніж рівноважна відстань у



F_1 - сила притягання; F_2 - сила відштовхування;

r_0 - рівноважна відстань; $r_3 > r_0$; r_1 - міжатомна відстань; $r_1 < r_0 < r_2$.

Рис. 2. Сили міжатомної взаємодії: а, с - комірки кристалічної ґратки; б - залежність сили взаємодії від міжатомної відстані.

двохатомній моделі r_0 (рис. 2 с). Звичайно, у випадку асиметричного потенціалу міжатомної взаємодії, коли рівноважне положення у напрямі до ближніх і дальніх сусідів знаходиться на різній відстані r_1 і r_2 утвориться також квадратна ґратка, в якій стиск відсутній, а сили відштовхування між ближніми атомами та сили притягання між дальніми атомами не виникають [2]. Що стосується класичної моделі, на якій пояснюють високу міцність кристалів, то у ній врахована взаємодія тільки між атомом і його найближчими сусідами.

Про вкорочення міжатомної відстані порівняно з рівноважною у ґратках деяких металів згадувалося раніше [3-6]: “Аналіз діаграм найближчих сусідів (атомів, пр. авт.) дозволяє припустити, що у структурі А2 легко стискуваних металів атоми дещо деформовані у напрямі контактів з вісьма найближчими сусідами. Цим забезпечується вкорочення міжатомних відстаней у контакті з шістьма атомами – другими найближчими сусідами, при цьому спостережувані експериментально відстані між найближчими сусідами виявились трохи коротшими, ніж нормальний “власний” діаметр атомів” [4 ч. 1, с. 179].

Але нам не відомо випадків, коли вищезгаданий ефект досліджувався б при моделюванні кристалічних ґраток, тому метою даної роботи є дослідження двохмірної кристалічної ґратки з квадратною коміркою і сферично-симетричним потенціалом міжатомної взаємодії.

У нашій моделі сили взаємодії при розрахунках приймали короткодійними, що поширюються на перших та других сусідів

атома, тобто радіус дії міжатомних сил обмежувався відстанню $r=2r_0$, де r_0 рівноважна відстань між атомами у двухатомній моделі твердого тіла. Енергію зв'язку між двома атомами, як і у роботі [1], визначали з загального рівняння:

$$U = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}, \quad (1)$$

де A і B – константи; r – відстань між атомами; m і n – показники степені для енергії сил притягання і сил відштовхування відповідно. При цьому завжди $n > m$. Мінімум потенціальної енергії пари атомів досягається при $r = r_0$, коли $dU/dr = 0$.

Оскільки розрахунки проводяться для встановлення якісних характеристик моделі, то дані у рівнянні (2) вибрані довільно і близькі по величині для реальних кристалів. Для нашого випадку вважатимемо константу A і показник степені m рівними одиниці, а показник степені $n=8$ і рівноважну відстань $r_0=2.5 \text{ \AA}$.

Потенціальну енергію атома у кристалі визначали як суму енергій його парної взаємодії з першими і другими сусідами:

$$E_A = U_{A1} + U_{A2} + U_{A3} + U_{A4} + U_{A5} + U_{A6} + U_{A7} + U_{A8}. \quad (2)$$

Потенціальну енергію кристала одержали шляхом сумування енергій N атомів, з яких складається кристал:

$$E_K = 0,5 \sum E_N. \quad (3)$$

Розрахунок параметра ґратки

Міжатомна відстань у кристалах визначається з умови мінімуму їх потенціальної енергії, яка у загальному випадку вираховується по формулі (4). Для кристала, який складається з N^2 атомів, потенціальна енергія є функцією міжатомної

відстані і визначається з виразу:

$$E_K = 0.5[(N-2)^2 E_3 + 4(N-2)E_2 + 4E_1], \quad (4)$$

де N – кількість атомів на одній зі сторін квадратного кристала; (Формула (4) одержана шляхом встановлення закономірності при розрахунку кристалів, які складаються з $2^2, 3^2, 4^2 \dots N^2$ атомів);

$E_3 = 4U(r_1) + 4U(r_2)$; $E_2 = 3U(r_1) + 2U(r_2)$; $E_1 = 2U(r_1) + 2U(r_2)$ – потенціальна енергія відповідно внутрішніх, поверхневих та кутових атомів кристала;

$U(r_1)$; $U(r_2)$ – потенціальна енергія парної взаємодії атомів між найближчими та наступними сусідами атома, r_1, r_2 – відстань між першими і другими сусідами:

$$r_2 = \sqrt{2}r_1$$

Величини $U(r_1)$; $U(r_2)$ дорівнюють:

$$U(r_2) = B \frac{1}{(\sqrt{2}r)^n} - \frac{1}{(\sqrt{2}r)^m},$$

$$U(r_1) = B \frac{1}{r^n} - \frac{1}{r^m}, \quad (5)$$

де $B = \frac{m}{n} \frac{r_0^{n+1}}{r_0^{m+1}}$ – константа; r_0 – рівноважна відстань у двоатомній моделі.

Початкове розміщення атомів вибирали у вигляді квадратних комірок, у вершинах яких знаходились атоми. Відстань між атомами змінювали від $r > r_0$ до $r < r_0$ через малий інтервал, при цьому кожний раз вираховували потенціальну енергію кристала. На рис. 3 приведений графік

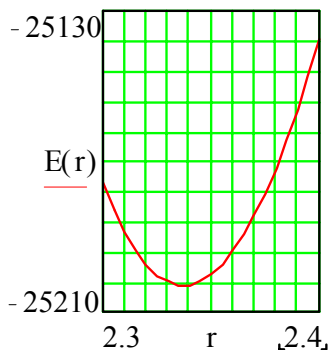


Рис. 3. Залежність потенціальної енергії від міжатомної відстані у кристалі з 100^2 атомами.

залежності потенціальної енергії кристала від відстані між атомами. Значення r , при якому енергія кристала мінімальна, визначає

його міжатомну відстань і відповідає найбільш стійкому положенню для кристала даної конфігурації.

Міжатомну відстань розраховували для кристалів різних розмірів з кількістю атомів від $N=2^2$ до $N=\infty$ (рис. 4).

Одержані дані свідчать про зменшення міжатомної відстані при збільшенні розмірів кристала. Мінімальне значення міжатомної відстані відповідає кристалу безмежних розмірів. У цьому випадку міжатомну відстань вираховували з умови такого розміщення атомів, коли енергія їх мінімальна. Потенціальна енергія внутрішнього атома визначається за формулою (3) і з урахуванням рівнянь (5) дорівнює:

$$E_A(r) = 4U(r_1) + 4U(r_2). \quad (6)$$

Згідно розрахунку міжатомна відстань становить $r = 2,34 \text{ \AA}$ і є меншою ніж у двоатомній моделі, де $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$. Цей результат означає, що кристали, в яких міжатомна взаємодія описується сферично симетричним потенціалом, є стиснутими, тобто їх міжатомна відстань вкорочена, у порівнянні з рівноважною міжатомною відстанню r_0 . Це означає, що між

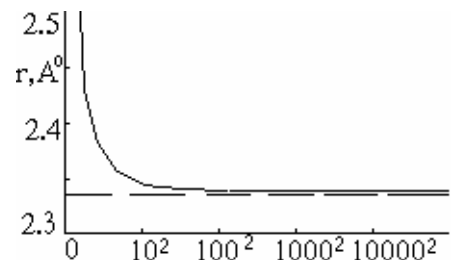


Рис. 4. Залежність параметра ґратки від кількості атомів у двоатомному кристалі.

найближчими атомами існують сили відштовхування, а між дальніми – сили притягання, про що вже згадувалось вище. Слід зауважити, що якщо врахувати дію міжатомних сил на більшу відстань, тобто взаємодію більшого числа атомів, то вкорочення міжатомної відстані буде більше.

Більша міжатомна відстань у малих за розмірами кристалах свідчить про меншу потенціальну енергію їх атомів (рис. 5), тому слід очікувати пониження температури їх плавлення. Останнє має експериментальне підтвердження [7, с. 167]:

"Чим менші розміри частинок речовини, тим

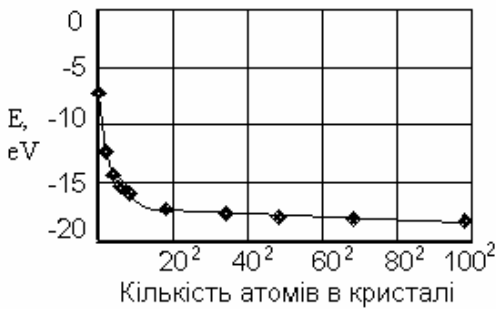


Рис. 5 Залежність енергії атома від розміру двовимірного кристалу.

нижча точка її плавлення. Наприклад, частинки золота розміром 0.01 мк плавляться не при 1063 °С, як повинно плавитись золото, а лише при 887 °С.

Вкорочення міжатомної відстані у кристалах, атоми яких мають сферично симетричний потенціал сил взаємодії, впливає на формування рельєфу потенціальної енергії у площинах його зсуву. У свою чергу, цей рельєф визначає величину енергії, яка необхідна для зсуву атомної площини у кристалі.

Визначення енергії зсуву при малих деформаціях

Розглянемо кристал, ширина якого складає N атомів (рис. 6). Енергія необхідна для зсуву атомної площини визначається тільки зміною енергії взаємодії атомів цієї площини і сусіднього ряду. Зміна енергій взаємодії викликана зміною відстані між атомами. Відповідно до розрахункової схеми (рис. 7) затрати енергії на зсув внутрішнього атома 1 у напрямі $[100]$ визначається як різниця потенціальної енергії його взаємодії з трьома атомами 2, 3, 4 до і після зсуву на відстань z :

$dE(z) = E^2 - E^1 = U_{12}^2 + U_{13}^2 + U_{14}^2 - (U_{12}^1 + U_{13}^1 + U_{14}^1)$ (7)
де $E^1 = U_{12}^1 + U_{13}^1 + U_{14}^1$; $E^2 = U_{12}^2 + U_{13}^2 + U_{14}^2$ – енергія взаємодії атома 1 з атомами 1; 2; 3 до і після зсуву атомної площини;

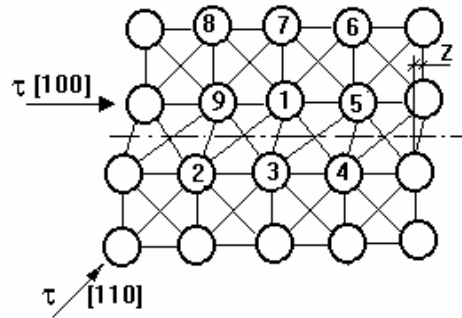


Рис. 6. Зсув атомної площини.

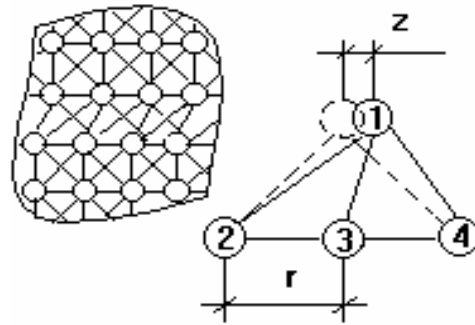


Рис. 7. Схема розрахунку затрати енергії на зсув внутрішнього атома.

U_{12}^1 ; U_{13}^1 ; U_{14}^1 – потенціальна енергія парної взаємодії атома 1 з атомами 2; 3; 4 до початку зсуву атомної площини; визначається з рівнянь (5)
 $U_{12}^2(z) = B[(r+z)^2 + r^2]^{-n/2} - [(r+z)^2 + r^2]^{-m/2}$;
 $U_{13}^2 = B(r^2 + z^2)^{-n/2} - (r^2 + z^2)^{-m/2}$;
 $U_{14}^2 = B[(r-z)^2 + r^2]^{-n/2} - [(r-z)^2 + r^2]^{-m/2}$, – залежності потенціальної енергії взаємодії атома 1 з атомами 2; 3; 4 від зміщення z атомної площини.

Аналогічно визначали затрати енергії для зсуву атома 1 у напрямі $[110]$. Графіки цих функцій приведені на рисунку 8. При зсуві атомних площин у напрямі $[100]$ спостерігається зниження потенціальної енергії атомів (крива 1), а у напрямі $[110]$ для зсуву атома необхідні значні затрати енергії, про що свідчить крива 2. Зниження потенціальної енергії атомів при зсуві атомної площини у напрямі $[100]$ є свідченням нестійкості кристала при дії малих зсувних деформацій.

При зсуві атома на відстань більшу

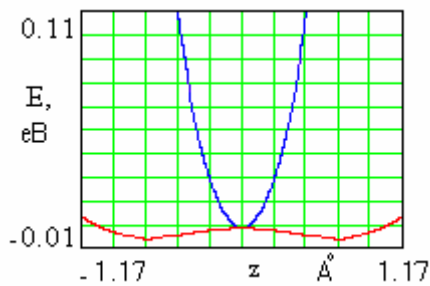


Рис. 8. Зміна потенціальної енергії атома при зсуві атомних площин z у напрямі [100] - 1, і у - [110] - 2.

міжатомної необхідна така мала кількість енергії, що можна вважати її близькою нулю, що свідчить про відсутність опору зсуву атома, оскільки дно потенціальної ями є плоским таким, як і у випадку одержаному на трьохатомній моделі рідини [1]. Плоский рельєф потенціальної енергії дає деяку степінь свободи для переміщення атомів, тому для рідин характерна текучість. Подібний рельєф, одержаний для кристалічної ґратки, повинен обумовлювати подібну текучість бездефектних кристалів. Цей висновок має експериментальне підтвердження: [8] с. 64: «Таким чином, металічний монокристал у початковому незміцненому стані за властивостями течіння при дії малих напружень подібний ідеальній ньютонівській рідині. Але надалі, у міру того як збільшується пластична деформація, металічний монокристал стає твердо-пластичним тілом, яке має визначену границю пружності (границю повзучості) і все більше і більше «твердіє» у тому розумінні, що його границя пружності безперервно підвищується разом з ростом деформації...»; с. 21: «Пластичне течіння у металічних монокристалах виникає при якому-небудь малому напруженні. А це означає, що істина границя текучості для таких монокристалів практично дорівнює нулю». [9] с. 194: «На протязі десятиріч для границі течіння монокристалів кожного металу отримували все меншу і меншу величину по мірі того, як покращувалась чистота і степінь досконалості кристалів». [10] с. 339: «Питання про граничне значення цієї м'якості (текучості авт.) не може ще рахуватися остаточно визначеним;

можна думати, однак, якщо екстраполювати відомі сьогодні факти, що в ідеальному кристалі, який не піддавався раніше ніякій деформації, початкова твердість (опір зсуву авт.), у крайньому випадку для деяких площин і напрямів пластичної деформації, дорівнює нулю»

Але кристалографічна направленість течіння металічних монокристалів і зміцнення у процесі деформації відрізняє їх від рідини. У даному випадку кристалографічна направленість зсуву атомних площин обумовлена тим тим, що при зсуві атома затрати енергії відсутні, у той час як для зсуву атомної площини у напрямі [110] необхідна значна енергія, яка є співрозмірною з енергією для зсуву внутрішнього атома у загально прийнятій класичній моделі кристала.

Слід зауважити, що низькі затрати енергії на зсув кристалічної ґратки є властивими для кристалічної ґратки ідеального будови. Але ідеальна будова кристалічної ґратки можлива, якщо число атомів безмежне, а у випадку обмеженого числа атомів, ідеальна структура буде займати тільки частину об'єму. У поверхневому шарі атоми розміщені по іншому і властивості мають інші. «Всі суцільні і, у тому числі, тверді середовища мають тонкий характерний шар, властивості якого різко відрізняються від середовища у внутрішніх об'ємах» [11]. Отже поверхневі шари, а також границі блоків і зерен та всякого роду дефекти є перешкодою зміцненню атомних площин. Нижче приведено розрахунок енергії зсуву атомної площини з урахуванням поверхневого шару.

Визначення затрати енергії на зсув поверхневого атома

Модель кристала розглядали як двофазну систему, яка складається з внутрішніх областей нестійкої ґратки ідеальної будови і поверхневих шарів, які перешкоджають зміцненню атомних площин. «При цьому недеформований об'єм кристалу ніби заточений у більш жорстку «сорочку» приповерхневого шару, який є зміцненим підвищеною густиною дислокацій [с. 31, 29]».

Визначення затрати енергії на зсув

поверхневого атома проводилось по схемі приведеній на рис. 9, при цьому вважали, що міжатомна відстань у поверхневому шарі дещо більша ніж у внутрішніх областях і

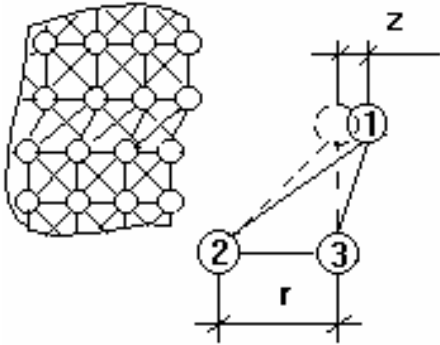


Рис. 9. Схема розрахунку енергії зсуву поверхневого атома.

становить $r=2,5 \text{ \AA}$. Товщину поверхневого шару приймали два атоми. Але товщина поверхневого шару, який має специфічну будову, може бути значно більшою, особливо у великих кристалах «Як було показано у розд. 3, для ряду перехідних металів з ОЦК та ГЦК ґраткою виявлено більш складний вид поверхневої релаксації – багат шарова релаксація. Поверхня характеризується багат шаровою релаксацією у випадку, коли два або більше верхніх атомних шарів кристала, паралельних поверхні, зміщуються до верху або до низу порівняно з положеннями в об'ємі [с. 132, 33].»

Потенціал міжатомної взаємодії у поверхневому шарі приймали таким же як і для внутрішніх областей кристалічної ґратки. Функція потенціальної енергії поверхневого атома має вигляд:

$$E_{\text{IП}}(z) := U_{3\text{П}}(z) + U_{2\text{П}}(z), \quad (8)$$

де $U_{3\text{П}}(z)$; $U_{2\text{П}}(z)$ – енергія взаємодії атома 1 з атомами 2 і 3 відповідно:

$$U_{3\text{П}}(z) := \frac{V}{(r_1^2 + z^2)^n} - \frac{1}{(r_1^2 + z^2)^m}$$

$$U_{2\text{П}}(z) := \frac{V}{\left[(r_1 + z)^2 + r_1^2 \right]^n} - \frac{1}{\left[(r_1 + z)^2 + r_1^2 \right]^m}$$

Енергія, яка затрачається для зсуву атомної площини з N атомами з урахуванням опору поверхні, визначається як сума затрати енергії зсуву N атомів і енергії затраченої на опір зі сторони

поверхні:

$$dE(z, N) := 3 \cdot dE_{\text{IП}}(z) + dE(z, N) \quad (9)$$

де $dE(z, N) := E(z, N) - E(0, N)$ – затрати енергії на зсув атомної площини;

$$dE(z, N) := (N - 2) \cdot [(U_{13}(z)) + U_{12}(z) + U_{14}(z)] - E(0, N).$$

$dE(z, N) := (N - 2) \cdot [(U_{13}(z)) + U_{12}(z) + U_{14}(z)]$ – потенціальна енергія внутрішніх атомів у площині, з якою вони зміщуються;

$E(0, N)$ – потенціальна енергія внутрішніх атомів перед зсувом;

$dE_{\text{IП}}(z) := E_{\text{IП}}(z) - E_{\text{IП}}(0)$ – затрати енергії на зсув поверхневих атомів;

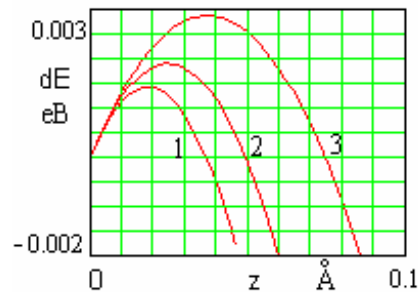
$$dE_{\text{IП}}(z) := (E_{3\text{П}}(z) + U_{2\text{П}}(z)) - E_{\text{IП}}(0)$$

$$E_{\text{IП}}(z) := U_{3\text{П}}(z) + E_{2\text{П}}(z)$$

потенціальна енергія поверхневих атомів при їх зміщенні;

$E_{\text{IП}}(0)$ – потенціальна енергія поверхневих атомів перед зсувом.

На рис. 10 приведені графіки затрати енергії на зсув атомної площини у напрямі [100] для кристалів шириною у 100 атомів, 150 і 200 атомів. З цих графіків видно, що



N – кількість атомів в площині зсуву.

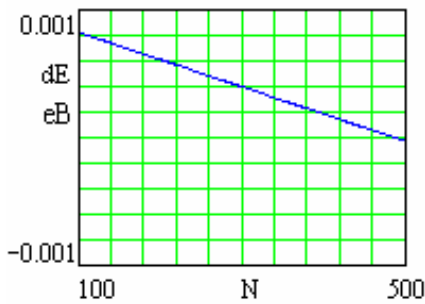
Рис. 10. Зміна затрати енергії на зсув атомної площини у кристалах шириною: 1 – 200; 2 – 150; 3 – 100 атомів.

при малому зсуві атомної площини витрата енергії зростає. При зсуві атомної площини на більшу відстань потенціальна енергія знижується. Максимум на кривій залежності зміни енергії від величини зсуву атомної площини розділяє деформацію на дві області – стійку і нестійку. Стійка область деформації характеризується затратою енергії на зсув. Для зміщення атомної площини у цій області необхідне зовнішнє зусилля. Якщо зусилля зняти, то система повернеться у початкове положення, де її

енергія мінімальна – це зона пружних деформацій. У нестійкій області при зміщенні атомної площини енергія знижується і може відбуватись у відсутність зовнішніх сил. Зміщення атомної площини поза максимум на кривих 1-3 можна вважати елементарним актом пластичної деформації.

Відповідно до рис. 10 при деформації товстих монокристалів нестійка зона досягається раніше ніж у тонких. Подібний характер деформації характерний для реальних кристалів. Так, межа пружної деформації товстих кристалів і їх міцність на 3-4 порядки менші ніж у ниткоподібних кристалах «вусах».

На рис. 11 приведена залежність затрати енергії при зсуві кристалів у напрямі [100] від їх розмірів. Виявлено, що енергія зсуву



N – кількість атомів в площині зсуву.

Рис. 11. Затрати енергії при зсуві атомної площини на $z = 0.01 \text{ \AA}$ у кристалі.

атомної площини на відстань 0.01 для тонких двовимірних кристалів додатна і це свідчить про їх високу стійкість і міцність. Збільшення розміру кристала приводить до зниження енергії зсуву і при ширині біля 500 атомів ця енергія знижується до нуля, а далі стає від'ємною.

Зміна витрати енергії при деформації кристала від його розміру пояснюється тим, що при зсуві поверхневих атомів затрати енергії майже незмінні, у той час як зниження енергії при зміщенні внутрішніх атомів у положення з нижчою потенціальною енергією залежить від кількості атомів у площині, тобто від розміру кристала. Для тонких кристалів витрата енергії при зсуві поверхневих атомів перевищує вигреш енергії при зсуві внутрішніх атомів, але по досягненні кристала деякого розміру, у нашому

випадку близько 500 атомів у поперечнику, вигреш в енергії перевищує її затрати.

Одержані дані є підставою для припущення, що реальні кристали великих розмірів і правильної будови нестійкі відносно малих зсувних деформацій. Тому для системи з великого числа атомів більш ймовірний стан існування – у вигляді сукупності малих кристалів (зерен та субзерен). Кристали значних розмірів нестійкі і діляться на дрібні кристали шляхом зсуву атомних площин при дії незначних зовнішніх зусиль. По мірі дроблення кристала на малі кристали його стійкість зростає. У цьому випадку можна говорити про перетворення монокристала у полікристал, у якого опір зсуву атомних площин залежить від розміру субзерен чи зерен.

Відповідно до одержаних результатів моделювання, двовимірний кристал має внутрішні області правильної кристалічної ґратки і приповерхневий шар, властивості якого відрізняються від властивостей внутрішніх областей. Для внутрішніх областей характерним є низький, близький нулю, опір зсуву атомних площин. Стійкість такого кристалу обумовлена наявністю поверхневого шару, який створює опір зсуву атомних площин.

Замінімо опір зі сторони поверхневого шару умовною силою F. Оскільки товщина поверхневого шару кристала зі зміною його розмірів майже незмінна, то вважатимемо незмінною силу F. Границя текучості

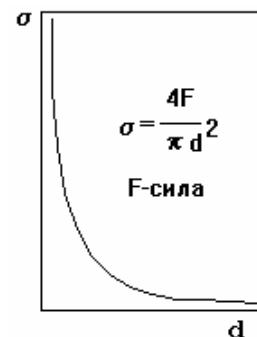


Рис. 12. Теоретична залежність міцності кристалів від їх діаметру d.

кристала для такої розрахункової схеми залежатиме від розміру кристала і може змінюватись від високих значень для дуже тонких кристалів (“вусів”) до нульових

значень для товстих монокристалів, що витікає з формули: $\sigma=4F/\pi d^2$ (рис. 12).

Одержані результати можна використати для пояснення міцності ниткоподібних кристалів “вусів”. Їх міцність на один-два порядки перевищує міцність звичайних металів [12, 13]. Особливо висока міцність властива дуже тонким (біля 1-5 мкм) кристалам. Але по мірі збільшення діаметра вусів їх міцність знижується (рис. 13) і при розмірах більше 50 мкм міцність співрозмірна з міцністю звичайних металів.

високої міцності “вусів” не враховується вплив поверхні, і вважається, що “вуса” мають ідеальну бездефектну будову кристалічної ґратки. Але за даними роботи [24] у ниткоподібних кристалах спостерігали присутність осьових дислокацій, і при цьому ці кристали витримували деформацію від 0,2 до 10%. На сьогоднішній день показано, що у ниткоподібних кристалах можуть бути присутні дислокації у великій кількості.

Вищезгадане є підставою вважати, що

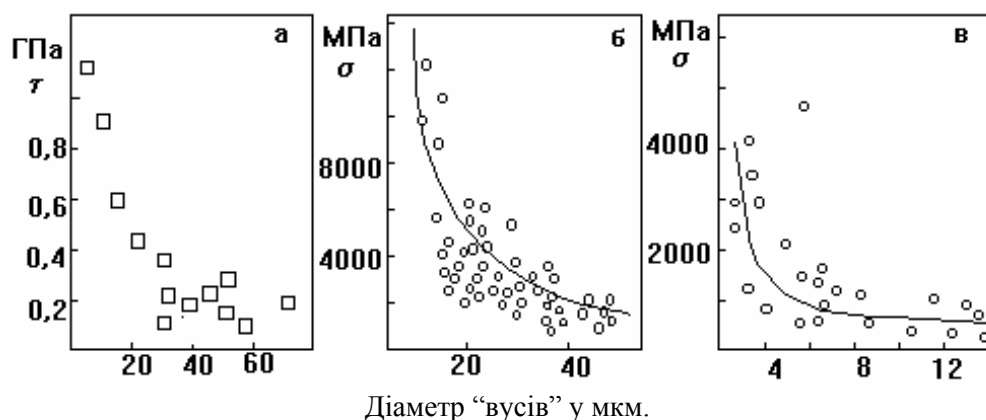


Рис. 13. Експериментальні залежності напруження зсуву від діаметру кристалів заліза а [12] і міцність кристалів заліза б і міді в [13].

Згідно нашої моделі, така зміна міцності ниткоподібних кристалів пояснюється впливом поверхні. Про особливості будови поверхні і її впливу на міцність твердих тіл згадується у багатьох роботах [14-19]. Надзвичайно низький опір зсуву бездефектної будови монокристалів чистих металів [8-10, 20, 21], про що вже згадувалось вище, є також хорошим підтвердженням запропонованої моделі.

Слід зауважити, що, відповідно до загальнопоширених поглядів, при поясненні

металам з бездефектною кристалічною ґраткою властивий низький опір зсуву атомних площин, що є причиною їх низької міцності та високої пластичності, що спостерігається у масивних монокристалах, чи відпалених металах. Деформовані області металів, де є велика кількість дефектів – поверхневі шари, границі зерен та блоків і т. і. є перешкодою для зсуву атомних площин, у результаті ці області підвищують міцність металів і знижують їх пластичність.

- [1] Л.Ю. Козак. Теоретичне дослідження процесу твердіння рідин // *Фізика і хімія твердого тіла*, 2(1), сс. 147-151 (2001).
- [2] Р. Фейнман и др. *Фейнмановские лекции по физике*. М.: Мир, т. VII, 293 с. (1977).
- [3] Р. Кан. *Физическое металоведение*. М.: Мир, 283с. (1970).
- [4] У. Пирсон. *Кристаллохимия и физика металов и сплавов*. М.: Мир, 419с. (1977).
- [5] Л. Козак. Пластическая деформация и неустойчивость кристаллов // *Деп. УкрНИИТИ*, 1969, Ук. 88 (1988).
- [6] Л.Ю. Козак. К вопросу о пластичности твердых тел // *Деп.-УкрНИИТИ*, 1982. №767Д.
- [7] С.И. Венецкий. *О редких и рассеяных*. М.: Металургия. 183 с. (1980).
- [8] В.И. Лихтман, П.А. Ребиндер, Г.В. Карпенко. *Влияние поверхностно-активной среды на процессы деформации металлов*. М.: Из-во АН СССР, 204 с. (1954).

- [9] Л.И. Миркин. *Физические основы прочности и пластичности*. М.: МГУ, 537 с. (1968).
- [10] Я.И. Френкель. *Введение у теорию металов*. Ленинград: Наука, 423 с. (1972).
- [11] Г.П. Черепанов. К общей теории разрушения // *ФХММ*, **1**, сс. 36-44 (1986).
- [12] Z. Wojarski, Z. Wokulski. Badania wiskerow zelaza w statycznej probie rozciagania // *Arch. hutn.*, **1**, pp. 3-26 (1980).
- [13] М.И. Гольдштейн др. *Металлофизика высокопрочных сплавов*. М.: Metallurgia. (1986).
- [14] Г.В. Бережкова. *Нитевидные кристаллы*. М.: Наука, 157 с. (1969).
- [15] С.З. Бокштейн и др. Особенности упрочнения металлических и неметаллических нитевидных монокристалов // *В сб. Физика деформационного упрочнения монокристалов*. Киев: Наукова думка, 267 с (1972).
- [16] В.П. Алехин. *Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов*. М.: Наука, 280 с. (1988).
- [17] Г. Глейтер, Б. Чалмерс. *Большеугловые границы зерен*. М.: Мир, 314 с. (1975).
- [18] В.Д. Кузнецов. *Поверхностная энергия твердых тел*. М.: ГИТТЛ, 217 с. (1954).
- [19] R.M. Latinision, A.J. Sedriks, A.C. Westwood. Surface sensitive mechanical behavior of metals // *Struct. and Properties Metal Surfase. Tokio*, pp. 500-538 (1973).
- [20] У.Г. Брэгг, У.Л. Брегг. *Кристаллические состояние*. М.: НТИ СССР, 336 с. (1938).
- [21] Е. Шмидт, В. Боас. *Пластичность кристаллов в особенности металлических*. М.: Л, 298 с. (1938).

L. Kozak

Investigation of Stability of Two Dimensional Crystal Lattice

Ivano-Frankivsk State University of the Oil and Gas, Karpatska Str., 15, 76000, Ukraine

In this paper, on the two-dimensional model it was shown that the crystal lattice can be unstable under influence of small shear deformation in specific conditions. It was found that the cause of this are, the first, potential geometry of the interatomic interaction and, the second, magnitude of thermal energy of atoms. In case of using the spherically symmetric potential for computer modeling crystall lattice the repulsive forces arise between the atoms and their nearest neighbours, which balanced by the attractive forces between atoms and their secondary neighbours. Such crystal lattice is unstable. Atomic planes slipes under small external forces. A group of atoms displace into position of lower potential energy.