

УДК 620.171.3

Л.Ю. Козак  
**Пластичність металів як вияв нестійкості  
кристалічної ґратки**

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти й газу  
76000, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15,  
тел. (03722)42351, E-mail: [kozakl@ifdtung.if.ua](mailto:kozakl@ifdtung.if.ua)*

У статті викладено нові погляди на природу пластичності металів, в основу яких закладено ідеї нестійкості. На основі власних досліджень і відомих експериментальних даних показано, що пластичність металів є наслідком нестійкості ідеальної кристалічної ґратки.

На двомірній моделі було показано, що кристалічна ґратка при відповідних умовах може бути нестійкою відносно малих зсувних деформацій. Причиною нестійкості є, по-перше, геометрія потенціалу міжатомної взаємодії, по-друге, величина енергії коливань (теплова енергія) атомів. У випадку сферичної симетрії потенціалу міжатомної взаємодії кристалічної ґратки, між атомами і їх найближчими сусідами діють сили відштовхування, які врівноважуються силами притягання, що діють між атомами і їх дальніми сусідами. Така ґратка є стійкою при високій температурі і нестійкою при малих значеннях температури. Внаслідок нестійкості при дії зовнішніх зусиль атоми ґратки переміщуються у нові, більш стійкі, положення, у результаті чого відбувається пластична деформація.

**Ключові слова:** двомірна модель, потенціал міжатомної взаємодії, кристалічна ґратка, нестійкість.

*Стаття постуила до редакції 10.10.2001; прийнята до друку 12.02.2002.*

## I. Вступ

Відповідно до сучасних поглядів фізики міцності й пластичності для зсуву атомних площин в ідеальній кристалічній ґратці твердих тіл необхідні високі напруження. Це означає, що ідеальна кристалічна ґратка є стійкою до зсувних деформацій. Для обґрунтування цього твердження використовується відома розрахункова схема (рис. 1). Згідно з цією схемою розрахункове напруження зсуву атомної площини є дуже високим. А підставою для цього твердження є те, що більшість

матеріалів має високі значення модулів<sup>1</sup> зсуву і для досягнення деформації, яка дорівнює половині міжатомної відстані, необхідні високі напруження. У реальних матеріалах при дії зовнішніх сил кристалічна ґратка досягає значно менших значень пружної деформації зсуву, в порівнянні з теоретично можливою, відповідно до класичної схеми (рис. 1), після чого втрачає свою стійкість і далі деформується уже пластично. Тому реальні значення міцності металів і їх

---

<sup>1</sup> Характеристика матеріалу, яка також залежить від величини сил міжатомної взаємодії.

сплавів на 3-4 порядки менші ніж теоретично розраховані на основі значень модулів пружності. Але чи можна ототожнювати модуль пружності, який майже не залежить від структури твердих тіл, і міцність, яка дуже залежна від структури матеріалу? Так, міцність металічних масивних монокристалів складає  $10^4-10^5$  Па, полікристалічні метали мають міцність порядку  $10^7-10^8$  Па, а міцність ниткоподібних кристалів сягає  $10^9-10^{10}$  Па. Отже у залежності від структури міцність може змінюватись у  $10^5-10^6$  раз, тоді як модуль зсуву змінюється на кілька процентів.

Слід також відмітити, що у класичній моделі враховують лише сили взаємодії між атомами та їх першими сусідами і не враховують сили взаємодії атомів і їх наступних сусідів, а також – тип і геометрію потенціалу міжатомної взаємодії. Крім того, при розрахунку міцності твердих тіл по цій схемі не враховують вплив внутрішньої (теплової) енергії ґратки. Остання обставина є дуже важливою, оскільки тепла енергія ґратки може не тільки значно знижувати міцність твердих тіл [1], але й викликати втрату її стійкості відносно зсувних деформацій при плавленні, чи поліморфному перетворенні.

Через недосконалість класичної моделі теоретично розрахована міцність значно перевищує реальне значення міцності металів і їх сплавів. Для пояснення невідповідності теоретичних розрахунків

міцності (межі течіння) ідеальної кристалічної ґратки з експериментальними даними для реальних матеріалів була створена дислокаційна модель. Відповідно до цієї теорії напруження зсуву атомних площин в ідеальній кристалічній ґратці значно знижується у присутності у ґратці незначної кількості дислокацій. Разом з тим зростання кількості дислокацій викликає підвищення опору зсуву атомних площин.

Ці погляди на природу пластичної деформації, основою яких є дислокаційна модель, запропоновані Тейлором, Орованам і Полянці ще у 30-х роках і сьогодні є загально визнаними. Свого часу, дислокаційна модель піддавалась серйозній критиці, але критичне ставлення до неї не завадило її поширенню і визнанню, оскільки кращої моделі не запропоновано по сьогоднішній день.

Приблизно у той же час (30-ті роки) М. Борн у своїх теоретичних дослідженнях показав, що деякі кристалічні ґратки, типові для металів, нестійкі по деяким кристалографічним напрямкам відносно малих зсувних деформацій. Він же запропонував використати ці результати для удосконалення теорії міцності [2,3]. Однак, незрозуміло чому, нестійкість кристалічних ґраток не була використана для пояснення низького опору зсуву атомних площин, що спостерігається при деформації масивних металевих

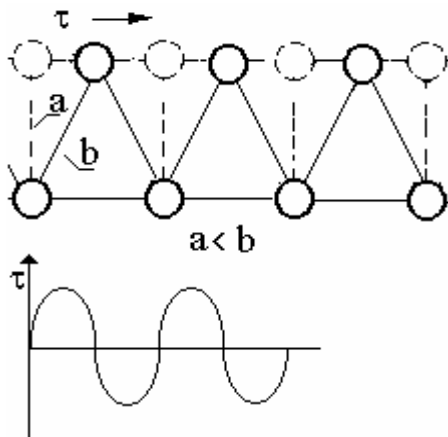


Рис. 1. Класична розрахункова схема зсуву атомної площини

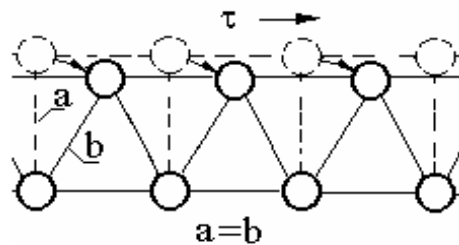


Рис. 2. Розрахункова схема зсуву атомної площини.

монокристалів високої чистоти і досконалої будови, міцність яких є нижчою на 2-3 порядки у порівнянні з міцністю технічних металів і їх сплавів [4-8].

У даній роботі подається оцінка дислокаційної моделі та запропонована для обговорення альтернативна модель. Ця робота є узагальненням ряду попередніх робіт [9-13]. Пропонується розглянути протилежну загальноприйнятим поглядам точку зору, відповідно до якої ідеальна кристалічна ґратка твердих тіл, для яких характерна металева пластичність, є нестійкою. Зсув атомних площин у бездефектній кристалічній ґратці здійснюється при дуже низьких значеннях зсувних напружень за механізмами ковзання і двійникування, але при відсутності дислокацій. А присутність дефектів і, передусім, тонкого поверхневого шару, а у полікристалах - границь зерен та блоків, підвищує опір деформації зсуву.

Розглянемо класичну схему, яка наведена на рис. 1. Відповідно до цієї схеми високі значення теоретичної міцності кристалічної ґратки зумовлені тим, що при розрахунку врахована лише одна умова стійкості, яка безпосередньо пов'язана з напрямом прикладеного напруження [2]. Згідно з класичною схемою високий опір зсуву атомної площини обумовлений тим, що при зміщенні атомів зростає міжатомна відстань і, відповідно, збільшується сила міжатомної взаємодії. Якщо ж зміщення атомів відбувається, як показано на рис. 2, то опір зсуву відсутній, оскільки відстань між атомами у цьому випадку не збільшується. Таким чином, використовуючи класичну схему можна показати, що у залежності від напрямку зсуву, кристалічна ґратка твердих тіл може бути як стійкою, так і нестійкою.

Що стосується експериментальних даних, які свідчать про високу стійкість кристалічних ґраток, то тут також є невідповідність.

У загальному, вплив дислокацій відображають відомою залежністю опору

зсуву від числа дефектів у кристалах (рис. 3), відповідно до якої міцність кристала відображена U-подібною кривою. Деякій густині дислокацій  $\rho$  відповідає мінімальний опір деформації кристала. Зменшення  $\rho$  порівняно з  $\rho$  призводить до підвищення міцності, оскільки наближає структуру до ідеальної. Підвищення числа дефектів у порівнянні з  $\rho$  викликає також підвищення міцності, але вже по іншій причині, а саме – внаслідок підвищення опору переміщення дислокацій.

Підтвердженням високої міцності ідеальної кристалічної ґратки є експериментальні дані міцності тонких ниткоподібних кристалів – “вусів”. Вважають, що “вуса” мають майже ідеальну внутрішню структуру, тому вони можуть витримувати значні пружні деформації.

Однак подальші дослідження [14-17] механічних властивостей “вусів” виявили ряд особливостей, які важко пояснити виходячи з точки зору класичних поглядів. Так, Бережкова і Рожанський [14] в електронному мікроскопі спостерігали полісинтетичні двійники у базисних стрічкоподібних ниткоподібних кристалах  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Під дією термічного удару ці стрічки розбивались на дуже тонкі (товщиною 20-50 нм) двійникові прошарки, утворюючи систему полісинтетичних двійників. При їх механічних дослідженнях виявилось, що вони мають найбільш високу міцність, яка досягає для стрічок перерізом 0,1-1  $\mu\text{м}^2$  до 15 ГПа. Міцність недеформованих стрічок того ж перерізу складала 5-10 ГПа.”

Висока міцність властива і для 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 [14].

Висока міцність характерна також для голчатих скалок (їх називають “тріски” або “вуса” розколу), які утворюються при розколі кристалів. При товщині кілька



Рис. 3. Залежність опору зсуву від густини дефектів у кристалах.

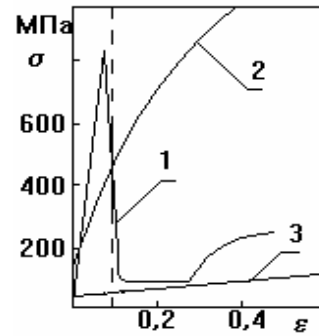


Рис. 4. Діаграма розтягу монокристалів міді [17]: 1 – тонкий вус, 2 – товстий вус, 3 – масивний монокристал.

мікрометрів їх пружні властивості відповідають ниткоподібним кристалам. Ці “тріски” за механічними властивостями подібні до ниткоподібних кристалів, але суттєво відрізняються від них гаммою інших ознак. У “трісках” вибірково травленням встановлено дуже високу густину дислокацій (до  $10^9 \text{ см}^{-2}$ ). Дислокації розміщені вздовж слідів ковзання. Це є свідченням того, що тріски піддаються пластичній деформації у процесі їх утворення [14].

Ще один результат [17], який важко пояснити з точки зору дислокаційної моделі, наведений на рис. 4. При деформації мідного “вуса” було досягнуте значне зміцнення, яке по величині близьке

до теоретичної міцності (1200 МПа). Міцність цього “вуса” після пластичної деформації перевищувала границю текучості більш тонкого “вуса”, хоч границя текучості більш товстого “вуса” була нижчою. Цей результат важко пояснити з точки зору ідеальної будови кристалічної ґратки.

Ряд досліджень свідчить, що у ниткоподібних кристалах можуть бути присутні дислокації у великій кількості, особливо у товстих зразках [14-16]. Бережковою було виявлено, що у всіх випадках, крім одного, ниткоподібні кристали з одною, або двома осьовими дислокаціями витримують деформацію від 0,2 до 10% [14]. Крім того, встановлено,

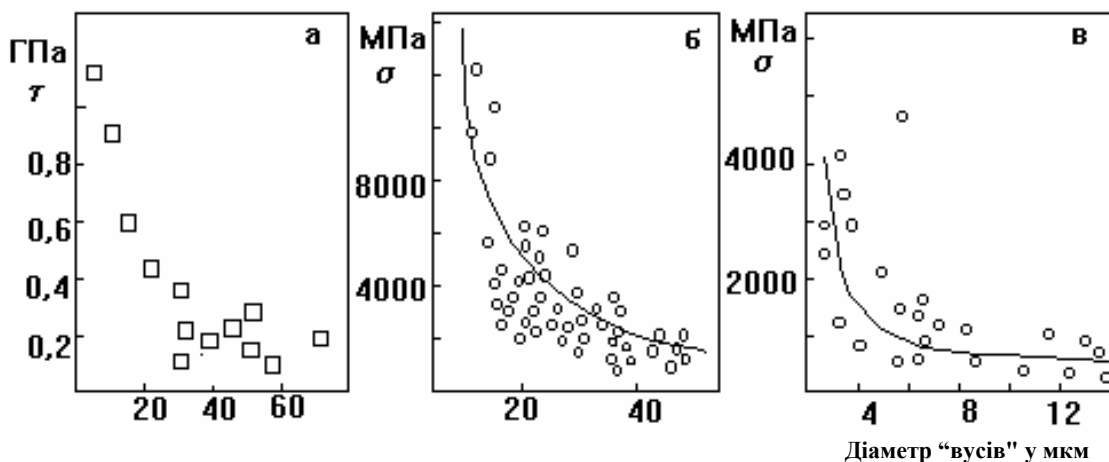
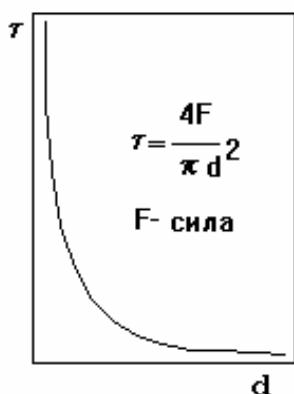
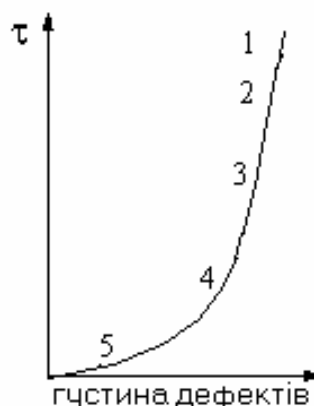


Рис. 5. Напруження зсуву (а) [18] і межа текучості (б, в) [19] у залежності від розміру кристалів; а, б – сталь; в – мідь.



**Рис. 6.** Теоретична залежність границі текучості кристалів від їх діаметра.



**Рис. 7.** Вплив структури на міцність: 1 – деформованих тонких кристалів і волокон, 2 – «вусів», 3,4 – технічних металів і їх сплавів, 5 – масивних монокристалів.

що міцність «вусів» залежить від їх розмірів [17,18]. Виявляється, що висока міцність, близька до теоретичної, характерна для «вусів» дуже малої товщини (менше 5 мкм). Зі збільшенням товщини «вусів» їх міцність падає і для товстих «вусів» (більше 50 мкм) співрозмірна з міцністю звичайних матеріалів (рис. 5).

Вищенаведені факти не вписуються у загальноприйнятую точку зору, відповідно до якої висока міцність «вусів» обумовлена їх ідеальною будовою. Якщо говорити про ідеальну будову кристалічної ґратки «вусів», то слід пам'ятати про їх поверхню, будова якої є відмінною від будови внутрішніх шарів. 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. Тому вільна поверхня є специфічним видом плоского дефекту у кристалі і має суттєвий вплив на його фізико-механічні властивості, а саме: на пружну стадію деформування, межу пропорційності і межу течіння, на загальний характер кривої «напруження-деформація» і різні стадії деформаційного зміцнення (на коефіцієнти деформаційного зміцнення і довготривалість окремих стадій); на процеси крихкого і втомного руйнування,

повзучості, рекристалізації і т.і. [20]. Про особливості будови поверхні і її впливу на міцність твердих тіл йде мова у багатьох роботах [20-23].

Оскільки ниткоподібні кристали мають малий розмір, то їх поверхня займає значну частину у загальному об'ємі, а оскільки вона є довимірним дефектом, то не можна вважати будову тонких вусів ідеальною і що саме цим обумовлена їх висока міцність. Висока міцність тонких вусів обумовлена впливом поверхні. Високі, близькі до теоретичних, значення межі текучості тонких «вусів» (рис. 5) знижуються зі збільшенням їх діаметра і вище за 50 мкм падають до значень, близьких до міцності звичайних металів [17,18]. Таке пониження міцності монокристалів можна пояснити зменшенням впливу поверхні при збільшенні внутрішнього об'єму кристала [9].

Поверхневий шар, товщиною у кілька атомів, має специфічну будову, яка відрізняється від будови внутрішніх областей кристала. При зміщенні поверхневих атомів буде виникати сила опору. Опір зсуву внутрішніх атомів, згідно нашого припущення, буде рівним нулю. Вплив поверхневого шару у такому кристалі умовно можна замінити силою  $F$ . Оскільки товщина поверхневого шару кристала із зміною його поперечних розмірів майже не змінюється, то сила опору зсуву  $F = \text{const}$ . Границя текучості

кристалів у цьому випадку залежить від розміру кристала і може мінятися від високих значень для дуже тонких кристалів ("вусів"), до нуля для масивних монокристалів, що впливає з формули:  $\tau = 4F/d^2$ , графік якої (рис. 6) схожий на графіки експериментальних залежностей міцності "вусів" від їх розміру (рис. 5). Межа течіння масивних металевих монокристалів високої чистоти і правильної будови досягає значень на два три порядки нижчих за міцність реальних металів [4-8]. Відповідно до висновків деяких дослідників, при отримання все більш досконалих за будовою кристалів їх межа текучості буде наближатися до нуля [4-8]. Ці дані свідчать про нестійкість ідеальних кристалічних ґраток металів.

Відповідно до моделі, що пропонується, міцність кристалів залежить від співвідношення областей ідеальної кристалічної ґратки і дефектних областей кристала, включаючи приповерхневі шари. Оскільки ідеальна кристалічна ґратка не створює опору зсувним деформаціям, то переважання її областей у загальному об'ємі матеріалу сприяє зниженню міцності і підвищенню пластичності. У разі переважання дефектних областей – підвищується міцність і знижується пластичність.

Так, внаслідок пластичної деформації мідного товстого "вуса" кількість дефектних областей у ньому збільшилася, тому збільшилася його міцність<sup>2</sup>. Унаслідок деформації кристалічна ґратка руйнується і структура "вуса" стає аморфною, подібною як у скла. Звичайне скло має низьку міцність, але при відсутності поверхневих мікротріщин є дуже міцним, про що свідчать випробування тонких скляних ниток, у яких міцність на розтяг сягає близько 5000 МПа [14] (при міцності звичайного скла 40...60 МПа). Висока міцність "вусів" сколу, стрічкоподібних ниткоподібних кристалів  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  та ниткоподібних

утворень інтерметалів обумовлена високим вмістом у них дефектів. Вище згадані дані свідчать про те, що висока міцність, близька до теоретичної, досягається не тільки у кристалах досконалої будови.

Отже, аналогічно з вищенаведеною залежністю міцності (границі текучості) твердих тіл від кількості дефектів (рис. 3) подамо свою залежність зміни міцності кристалів (рис. 7). На цій залежності максимальну міцність мають тонкі склоподібні волокна і ниткоподібні кристали з деформованою до аморфного стану структурою, у яких відсутні мікротріщини. За ними ідуть тонкі "вуса", які, попри їх бездефектну внутрішню будову, мають поверхню як двомірний дефект, що займає значну частину у загальному об'ємі "вусів" через їх малі розміри.

Міцність масивних металічних монокристалів досконалої будови є найнижчою, оскільки вони знаходяться в області з низьким вмістом дефектів. Їх поверхня, як дефект, становить мізерну частину від всього об'єму кристала. Міцність полікристалічних металів займає проміжне положення між міцністю "вусів" і масивних монокристалів. Їх міцність залежить від розміру зерен і блоків (залежність Петча-Холла), оскільки границі зерен та блоків, як і поверхня, є дефектом.

Таким чином, відповідно до загальноприйнятих поглядів, ідеальна кристалічна ґратка металів є стійкою. Запропонована модель ідеальної кристалічної ґратки – нестійка. Згідно до цих припущень, у першому випадку, бездефектні метали повинні бути дуже міцні, у другому випадку, навпаки, не міцними (опір зсуву атомних площин близький до нуля). В обох випадках ці припущення не відповідають експериментальним даним і необхідне їх коректування. Тому, у першому випадку, вважають, що опір зсуву знижується через присутність у кристалічній ґратці дефектів (дислокацій), у другому випадку, навпаки, відсутність дефектів обумовлює низький опір зсуву. В обох випадках, коли враховують вплив

<sup>2</sup> При значній пластичній деформації міцність технічних металів знижується внаслідок виникнення мікротріщин і підвищення чутливості до них зміцненого деформацією металу.

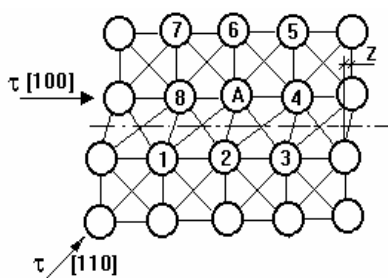


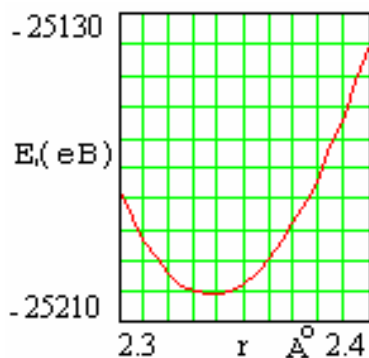
Рис. 8. Зсув атомної площини.

дефектів, розрахункові значення міцності відповідають міцності реальних металів.

Потрібно також зазначити, що у класичній моделі, як і запропонованій, використовується ідея нестійкості, оскільки дислокації є локальними нестійкими областями кристала, в яких атоми розташовані з відхиленням від їх відповідного положення в ідеальній кристалічній ґратці і їх потенціальна енергія дещо збільшена. Однак, у класичній моделі розглядається локальна нестійкість, а у тій, що пропонується – глобальна нестійкість кристала.

## II. Нестійкість кристалічної ґратки

Розглянемо двовимірну модель кристалічної ґратки (рис. 8). Дослідження двовимірних кристалів з квадратною коміркою наведені у роботах [9-13]). Для визначення сил і енергії взаємодії між атомами використовували сферично симетричний потенціал Борна і вважали, що між атомами діють центральні сили. Сили взаємодії приймали короткодіючими, що розповсюджуються тільки на перших і других сусідів атома. Потенціальну енергію атомів цих ґраток розраховували як суму потенціальних енергій парної взаємодії атома з його першими і другими сусідами. Потенціальну енергію кристала визначали як суму енергій всіх атомів кристала [11]. Міжатомну відстань кристала визначали з умови мінімуму його потенціальної енергії. На рис. 9 наведений графік залежності потенціальної енергії

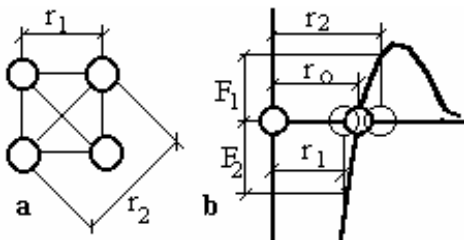
Рис. 9. Потенціальна енергія  $E$  як функція міжатомної відстані  $r$  у кристалі, що складається з 10000 атомів.

кристала від міжатомної відстані. Присутність мінімуму на кривій потенціальної енергії свідчить про можливість існування кристала. Місце положення мінімуму визначає міжатомну відстань для цього кристала.

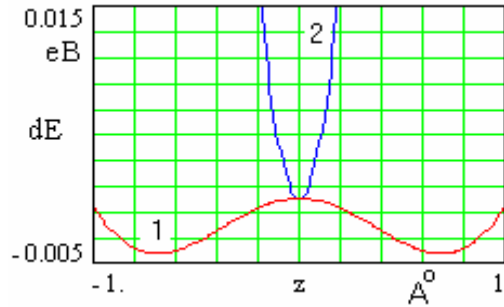
Виконані обчислення для кристалів, що складаються з різного числа атомів показали, що міжатомна відстань меншає, коли розмір кристала збільшується [11]. Межа цього зменшення обмежується міжатомною відстанню нескінченного кристала.

Зменшення міжатомної відстані для нескінченно великого кристала ( $r = 2,335 \text{ \AA}$ , рис. 9) у порівнянні з рівноважною відстанню для двоатомної моделі твердого тіла ( $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$ ) пов'язано зі сферичною симетрією потенціалу міжатомної взаємодії. Розглянемо це більш детально.

У разі сферично симетричного потенціалу неможливо розмістити атом і його перших і других сусідів на рівноважній відстані  $r_0$ . Якщо розмістити атом на відстані  $r_0$  від перших сусідів, то другі сусіди розмістяться на відстані  $r_2$  і, у цьому випадку, між ними виникнуть сили притягання. У моделі, що пропонується, урівноваження сил відбувається за рахунок зближення атомів (укорочення міжатомної відстані). У цьому випадку сили притягання  $F_1$  між атомом і другими сусідами збалансовані силами відштовхування  $F_2$  між атомом і першими сусідами (рис. 10). Потрібно зазначити, що у разі трьохмірної ґратки, цей ефект також



**Рис. 10.** Сили атомної взаємодії *b* у комірці кристала *a* у залежності від міжатомної відстані.  $r_1 < r_0 < r_2$



**Рис. 11.** Зміна потенціальної енергії атома при зсуві атомних площин *z* у напрямі [100] – 1, [110] – 2.

буде мати місце *a*, внаслідок більшої кількості других сусідів атома, укорочення міжатомної відстані буде більшим.

При сферичній симетрії потенціалу, перші сусіди атома у кристалічній ґратці розташовуються на відстані меншій ніж рівноважна, за рахунок чого зменшується відстань до їх других сусідів. Відбувається стискання кристалічної ґратки, у наслідок чого вона стає нестійкою. Про вкорочення міжатомної відстані у деяких металах, у порівнянні з рівноважною, згадується у роботах [24-27].

У такій моделі кристалічної ґратки зсув атомних площин відбувається при низьких зсувних напруженнях, близьких до нуля, про що свідчить залежність зображена на рис. 11. Тут наведена зміна потенціальної енергії атома при його зсуві з атомною площиною у двовірній кристалічній ґратці (рис. 8). Обчислення виконані для двох напрямів – напрямку, щільно упакованому атомами [100] і напрямку [110].

Згідно з результатами, що отримані при зсуві атомної площини у напрямі [100], потенціальна енергія атомів зменшується (крива 1, рис. 11) і збільшується при зсуві у напрямі [110] (крива 2, рис. 11). Зменшення потенціальної енергії атомів при зсуві у напрямі [100] є доказом нестійкості кристалічної ґратки відносно зсувної деформації. Атоми таких ґраток прагнуть переміститися у більш стійке положення.

Нестійка кристалічна ґратка існує завдяки присутності поверхневого шару, про що мова йшла вище. Вивчення впливу поверхні на міцність проводили на двовірній моделі кристала [9]. На

рис. 12 наведені залежності затрати енергії на зсув атомної площини у напрямі [100] з урахуванням опору поверхні для кристалів шириною у 100 атомів, 150 і 200 атомів. З цих графіків видно, що зона пружної деформації зсуву збільшується зі зменшенням розміру кристалів (точка перегину на кривій відділяє пружну зону деформації, у якій для деформації необхідно збільшувати енергію, від зони течіння, в якій зростання деформації призводить до зниження енергозатрат).

Наведені результати відображають якісну картину явища, оскільки вони отримані на двовірній ґратці. Разом з тим, ці результати є підставою для припущення, що реальні трьохвірні кристалічні ґратки можуть перебувати як у стійкому, так і у нестійкому стані. Стан ґратки визначається геометрією потенціалу міжатомної взаємодії і електронною структурою твердих тіл. Електронна структура твердих тіл і безпосередньо характер розподілу електронної щільності валентних електронів визначає геометрію потенціалу міжатомної взаємодії [28]. Загалом, потрібно розглядати два випадки, що визначають характер розподілу електронної щільності валентних електронів. Перший (розглядається у статті), це коли розподіл електронної щільності є сферично симетричним, тобто ізотропним, тоді сила взаємодії  $F$  є функцією відстані  $F = f(r)$  і зв'язки є ненаправленими – випадок, коли ґратка нестійка (металевий зв'язок). Другий випадок, коли розподіл електронної



щільності валентних електронів анізотропний (у сферичних координатах  $F = f(r, \varphi, \theta)$ ), тоді зв'язки мають направлений характер – ґратка стійка (ковалентний зв'язок). У першому випадку нестійкість ґратки обумовлює низьку міцність і високу пластичність металів, у другому – стійка ґратка твердих тіл з ковалентним зв'язком обумовлює їх високу міцність і низьку пластичність.

### III. Вплив температури

Дослідження кристалічної ґратки з урахуванням внутрішньої (теплової) енергії атомів показали, що на стійкість кристалічної ґратки, крім симетрії потенціалу міжатомної взаємодії, значний вплив має температура [12].

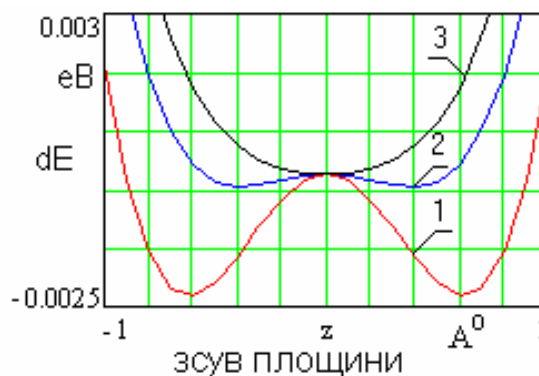
Підвищення температури розглядали як чинник, який створює додаткову силу відштовхування між атомами (внутрішній тиск), у результаті збільшується міжатомна відстань. Суть дослідження полягала у визначенні форми рельєфу потенціальної енергії атома при зсуві атомної площини у напрямі [100] при трьох різних температурах [12]. Різні температури моделювали як зміну міжатомної відстані. Графік 1 (рис. 13), що відображає зміну потенціальної енергії атома при зсуві атомної площини відповідає мінімальній температурі (0 К). Графіки 2 і 3 (рис. 13)

отримані для випадку, коли внаслідок підвищення температури, міжатомна відстань збільшується з  $r_0 = 2,335 \text{ \AA}$ , при температурі  $T_1$ , до  $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$  при  $T_2$  і  $r_0 = 2,6 \text{ \AA}$  при  $T_3$ . З урахуванням цього було виявлено, що збільшення відстані між атомами сприяє стабілізації ґратки. Про це свідчить зменшення "горба" на дні потенціальної кривої зміни енергії атома у кристалічній ґратці (рис. 13). При збільшенні відстані до 4% від рівноважної  $r_0$ , "горб" зникає, і ґратка стає стійкою. Звідси слідує, що квадратна ґратка, яка утворюється при кристалізації, є стійкою. Зниження температури є дестабілізуючим чинником, внаслідок якого квадратна ґратка стає нестійкою. При впливі незначних зовнішніх зусиль у такій ґратці відбувається зсув атомної площини. У результаті ґратка перетворюється з квадратної у трикутну, яка є стійкою при низьких температурах. Таке перетворення можна розглядати як процес пластичної деформації. Підвищення температури викликає зворотний процес – поновлення ґратки з квадратною коміркою. Схожий процес відновлення дефектної ґратки спостерігається при рекристалізації деформованих металів і їх сплавів після нагрівання.

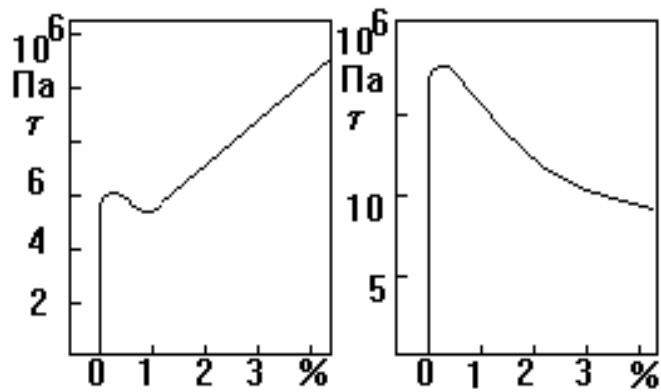
Поліморфні перетворення, які відбуваються у деяких металах та їх сплавах при зміні температури теж



**Рис. 12.** Зміна затрати енергії на зсув атомної площини у кристалах шириною: 1 – 200; 2 – 150; 3 – 100 атомів.



**Рис. 13.** Вплив теплового розширення на стійкість кристала. 1 –  $T_1$ ; 2 –  $T_2$ ; 3 –  $T_3$  – криві зміни потенціальної енергії атома A при зсуві атомних площин у залежності від температури:  $T_1 < T_2 < T_3$



Пластична деформація.

Рис. 14. Діаграми розтягу монокристалів фториду літію а і германію б [32].

пов'язані з нестійкістю кристалічної ґратки.

#### IV. Надпластичність

Вище було розглянуто вплив температури на стійкість ґратки за умови незмінності потенціалу міжатомної взаємодії. Але температура може також впливати на електронну структуру атомів, що у результаті призведе до зміни характеру сил міжатомної взаємодії. Не вдаючись до розкриття механізмів цих змін, будемо вважати, що у кінцевому результаті ці зміни призводять до зростання або зменшення рівноважної відстані  $r_0$  між атомами. Очевидно, що початкове розміщення атомів, яке відповідало попередньому значенню  $r_0$ , повинно змінитись при зміні цього  $r_0$ , оскільки попереднє положення вже не відповідатиме мінімуму потенціальної енергії цих атомів, які опинились у нестійкому положенні. Отже, зміна характеру сил міжатомної взаємодії, викликана зміною температури, дестабілізує ґратку (перетворює її у нестійку). Внаслідок втрати стійкості відбувається перетворення одного типу ґратки в інший тип, більш стійкий при відповідній температурі. Таке перетворення називається поліморфним. Існування явища поліморфного перетворення є свідченням того, що одна і та ж кристалічна ґратка у залежності від температури, може бути стійкою і

нестійкою.

При кристалізації розплаву металу ґратка утворюється стійкою, але по мірі зниження температури стійкість її знижується і при температурі поліморфного перетворення досягає такої величини, що атоми, у відсутність зовнішніх сил, починають переміщатись у більш стійкі положення, переборюючи опір зі сторони поверхневих шарів, границь зерен та блоків і інших дефектів. Прикладення незначних зовнішніх напружень до металів та їх сплавів при температурі близькій до температури поліморфного перетворення викликає значну пластичну деформацію і це явище відоме як надпластичність. Свідченням цьому є експериментальні дані, які одержані для різних матеріалів при фазових переходах першого роду та приведені висновки [29,30]. Вважається, що перетворення одної модифікації в іншу відбувається при напруженнях і температурах, які відповідають кривій фазової рівноваги, або близьких до них, і полягає у перебудові кристалічної ґратки, яка супроводжується змінами характеру сил міжатомної взаємодії. Таким чином, в основі процесів релаксації напружень і поліморфних перетворень лежить один і той же процес – перегрупування атомів у кристалі. Тому речовини при поліморфних перетвореннях більш пластичні, ніж у стані по обидві сторони фазової кривої.

Слід зауважити, що в основі процесу пластичності, який пропонується

описувати за нашою моделлю, і процесу надластичності при поліморфних перетвореннях лежить один і той же механізм – перегрупування атомів у кристали, з тією лиш різницею, що протікання цих процесів різне по напрямку та інтенсивності через різницю у величинах рушійних сил.

## V. Пластичність і електронна структура твердих тіл

Загальновідомо, що пластичність твердих тіл залежить не тільки від структури твердих тіл, але і від їх електронної структури, тобто від типу хімічного зв'язку. Пластичність найбільш характерна для речовин з металевим типом зв'язку, у той час як речовини з іншими типами зв'язку мало пластичні і крихкі. При цьому потрібно зазначити, що тип зв'язку є основним чинником, що визначає пластичність твердих тіл, у той час як структурний чинник є другорядним. (Так, дислокації присутні в іонних, ковалентних і металевих кристалах, однак тільки для металів характерна висока пластичність).

У нашому випадку, як було відмічено вище, пластичність (нестійкість кристалічної ґратки) залежить від електронної структури твердих тіл, оскільки електронна структура визначає геометрію потенціалу міжатомної взаємодії. У разі сферично-симетричного потенціалу, який характерний для тіл з металевим типом зв'язку [26], міжатомна відстань у кристалічній ґратці трохи укорочена (ґратка стискується), внаслідок чого вона стає нестійкою. Через додаткове зближення атомів відбувається перекриття зони валентних електронів із зоною провідності, тобто відбувається колективізація валентних електронів. Враховуючи це, легко пояснити зв'язок пластичності і електропровідності, який у свій час безуспішно намагався пояснити Френкель [8].

Існування зв'язку між зовсім різними явищами – пластичністю і електропровідністю зумовлено тим, що підвищення електропровідності і пластичності є

наслідком додаткового зближення атомів. Однак, природа цих явищ різна. Електропровідність є наслідком перекриття зони валентних електронів із зоною провідності, а пластичність – наслідком перетворення стійкої ґратки у нестійку. Про зв'язок пластичності і електропровідності свідчить загальновідомий факт, згідно з яким всі тверді тіла стають електропровідними і пластичними при впливі високого гідростатичного тиску, який сприяє додатковому зближенню атомів. Додаткове зближення атомів при впливі зовнішніх сил (гідростатичного тиску) є причиною пластичності і електропровідності твердих тіл. У відсутність зовнішніх сил вони втрачають ці властивості. У металах атоми зближені внаслідок специфіки їх міжатомної взаємодії, тому пластичність і електропровідність є їх характерними властивостями, що відрізняють метали від інших твердих тіл, особливо, від діелектриків.

Розуміння цього дозволяє пояснити аномальну, з точки зору сучасних поглядів, пластичність неметалічних кристалів. Тверді тіла з іонним міжатомним хімічним зв'язком вважаються крихкими, а ось хлорид срібла є досить пластичне. При кімнатній температурі брусок хлориду срібла можна розкатати у тонку пластину [31]

Відповідно до даних [32] монокристали фториду літію і германію теж пластично деформуються при звичайних умовах (рис. 14). Пластичність цих неметалічних тіл викликана нестійкістю кристалічної ґратки внаслідок вкороченої міжатомної відстані. Однак через слабкість сил взаємодії це зближення є недостатнім для перекриття зони валентних електронів з зоною провідності і тому для них не характерна висока електропровідність. З іншої сторони недостатнє зближення атомів ґратки є наслідком значно нижчої їх пластичності у порівнянні з металами.

Спроби пояснити пластичність твердих тіл виходячи з їх електронної структури, робилися раніше [32-40]. У роботі [39] на основі розгляду енергетичних рівнів атомів

у твердому тілі, був зроблений висновок, що локалізація електронів в атомно-мікроскопічному масштабі повинна призводити до підвищення міцності, делокалізація їх – до підвищення пластичності. По цій причині більшість кристалів з металевим типом зв'язку, який характеризується високою делокалізацією електронів, є пластичними, у той час як ковалентні кристали непластичні. У нашому випадку, пластичність металів зумовлена втратою стійкості ґратки внаслідок зближення атомів, яке також сприяє підвищенню делокалізації електронів.

Ці погляди були використані для пояснення залежності міцності металів від їх будови [40]. У чистих металах, через їх структурну неоднорідність, можливе співіснування областей, в яких міжатомна взаємодія розрізняється по ступені локалізації електронів, тобто ступені вияву міжатомних зв'язків різного типу – металевого або ковалентного. Вважається, що дефектним областям властивий ковалентний тип зв'язку, тому вони є крихкими, а області з бездефектною ґраткою мають металевий тип зв'язку і є пластичними. У цьому випадку, міцність металів залежить від співвідношення об'ємів цих областей і рівномірності їх розподілу, що повністю співпадає з поглядами, що пропонуються нами відносно міцності і пластичності твердих тіл.

Останнє дуже добре узгоджується з експериментальними даними залежності ступеня деформації металів і їх електропровідності. Загальновідомо, що по мірі зростання деформованості металів, їх пластичність і електропровідність сильно знижується. Це можна пояснити тим, що при збільшенні дефектних областей у металі, кількість областей з металевим зв'язком меншає, тому падає електропровідність та пластичність.

## VI. Висновки

1. Стійкість кристалічної ґратки залежить від електронної структури твердих

тіл і безпосередньо від характеру розподілу електронної щільності валентних електронів, яка визначає геометрію потенціалу міжатомний взаємодії. У разі ізотропного розподілу електронної щільності валентних електронів, коли потенціал є сферично симетричним, кристалічна ґратка твердих тіл нестійка. У разі анізотропного розподілу електронної щільності валентних електронів потенціал не є сферично симетричним і міжатомний зв'язок має направлений характер – кристалічна ґратка твердих тіл стійка.

2. Причиною нестійкості є укорочення міжатомної відстані через дію сил притягання між атомами і їх другими сусідами. За рахунок зменшення міжатомної відстані виникають сили відштовхування між атомами і їх першими сусідами, які врівноважують сили притягання.

3. У залежності від зовнішніх умов – температури і тиску, стан кристалічної ґратки може змінюватися зі стійкого у нестійкий і навпаки.

4. Пластичність і міцність бездефектних твердих тіл залежить від стану ґратки. Тверді тіла з нестійкою кристалічною ґраткою є пластичними і не міцними; з стійкою – високоміцні і крихкі.

5. Пластична деформація – це групове зміщення атомів у нестійкій ідеальній кристалічній ґратці, при цьому опір зсуву атомних площин низький. Існування у реальних кристалічних тілах дефектів (поверхневих шарів, границь блоків і зерен, дислокацій, вакансій) підвищує опір зсуву атомних площин.

Автор висловлює вдячність професору **Мельнику П.І.** за участь у обговоренні матеріалів статті і цінні зауваження.

*Л.Ю. Козак – к.т.н., доцент.*

- [1] В.Р. Регель, А.И. Слудкер, Э.Е. Томашевский. *Кинетическая природа прочности твердых тел*. Наука, М. 560 с. (1974).
- [2] M. Born. On the stability of crystal lattices // *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **36**, pp.160-172 (1940).
- [3] M. Born. On the stability of crystal lattices // *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **38**, pp.82-99 (1942).
- [4] У.Г. Брэгг, У.Л. Брегг. *Кристаллическое состояние*. НТИ СССР, М. 336 с. (1938).
- [5] Л.И. Миркин. *Физические основы прочности и пластичности*. МГУ, М. 537с. (1968).
- [6] Е. Шмидт, В. Боас. *Пластичность кристаллов в особенности металлических*. Л, М. 298 с. (1938).
- [7] 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).
- [8] Я.И. Френкель. *Введение в теорию металлов*. Наука, Ленинград. 423с. (1972).
- [9] Л.Ю. Козак. Дослідження стійкості двохвимірної кристалічної ґратки // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2(2)**, сс. 289-297 (2001).
- [10] Л.Ю. Козак. Теоретичне дослідження процесу твердіння рідин // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2(1)**, сс. 147-151 (2001).
- [11] Л.Ю. Козак. Комп'ютерне моделювання зсуву атомної площини у двовимірній ґратці // *ФХММ*, **1**, сс. 114-115, (1999).
- [12] Л. Козак. Комп'ютерне моделювання впливу температури на стійкість двовимірної кристалічної ґратки // *ФХММ*, **6**, сс.119-120 (1999).
- [13] L. Kozak. V. Vysochansky. Computer modeling of the metals plasticity. // *XV Physical metallurgy and materials science conference. 17-21 May 1998, Poland*, pp.283-287 (1998).
- [14] Г.В. Бережкова. *Нитевидные кристаллы*. Наука, М. 157 с. (1969).
- [15] А.М. Беликов. *Пластическая деформация нитевидных кристаллов*. Из-во ВГУ, Воронеж. 204 с. (1991).
- [16] С.М. Андропов, В.А. Грицких. Экспериментальное исследование пластичности нитевидных кристаллов меди // *ФММ*, **33(5)**, сс.1056-62 (1972).
- [17] С.З. Бокштейн и др. Особенности упрочнения металлических и неметаллических нитевидных монокристаллов // *В сб. Физика деформационного упрочнения монокристаллов*. Наукова думка, Киев. 267 с. (1972).
- [18] Z. Wojarski, Z. Wokulski. Badania wiskerow zelaza w statycznej probie rozciagania // *Arch. hutn.*, **1**, pp.3-26. (1980).
- [19] М.И. Гольдштейн, В.С. Литвинов, Б.М. Бронфин. *Металлофизика высокопрочных сплавов*. Металлургия, М. 312 с. (1986).
- [20] В.П. Алехин. *Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов*. Наука, М. 280 с. (1988).
- [21] М.А. Васильев. *Структура и динамика поверхности переходных металлов*. Наукова думка, Киев. 248с. (1988).
- [22] Г.П. Черепанов. К общей теории разрушения // *ФХММ*, **1**, сс. 36-44 (1986).
- [23] 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).
- [24] У. Пирсон. *Кристаллохимия и физика металлов и сплавов*. Мир, М. 419с. (1977).
- [25] Р. Кан. *Физическое металоведение*, **II**. Мир, М. 583с. (1970).
- [26] Л. Козак. Пластическая деформация и неустойчивость кристаллов // *Деп.-УкрНИИИТИ*, **1969**, Ук, 88. (1988).
- [27] Я.Й. Дутчак та ін. *Фізика металів*. НМК ВО, Київ. 162с. (1993).
- [28] П.И. Полухин и др. *Физические основы пластической деформации*. Металлургия, М. 256 с. (1984).
- [29] В.А. Калинин, И.С. Томашевская. О пластичности минералов при фазовых переходах // *Доклады АН СССР*, **268**, сс. 39-44. (1983).
- [30] А.С. Тихонов. *Эффект сверхпластичности металлов и сплавов*. Наука, М. 141с. (1978).
- [31] Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела*. Наука, М. 791с. (1978).
- [32] Ф. Набарро, З. Базинский, Д. Холт. *Пластичность чистых монокристаллов*. Металлургия, М. 213с. (1967).
- [33] В.Г. Глущенко. О природе хладноломкости переходных металлов // *МиТОМ*, **4**, сс. 2-4 (1982).
- [34] В.И. Шульга и др. Проблема механических свойств твердых тел // *ФЭТТ*, **3**, сс.3-35 (1979).

- [35] С.Н. Баринов, Ю.Л. Красулин. О переходе ионно-ковалентных кристаллов в пластическое состояние // *ДАН СССР*, **242**(6) сс.1317-1320. (1978).
- [36] Т.А. Конторова. О пластичности металлов // *ПП*, **10**, сс.107-111 (1977).
- [37] Г.В. Самсонов “Прочность и пластичность тугоплавких соединений // *Известия АН СССР*, **9**(10), сс.1680-1683 (1973).
- [38] Г.В. Самсонов, И.Ф. Прядко, Л.Ф. Прядко. *Электронная локализация в твердом теле*. Наука, М. 338с. (1976).
- [39] Г.В. Самсонов, И.Ф. Прядко, Л.Ф. Прядко. *Конфигурационная модель вещества*. Наукова думка, Киев. 316 с. (1975).
- [40] 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).

L.Yu. Kozak

## Plasticity of Metals as a Development of Instability of Crystal Lattices

*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 the article new views on a nature of the metals plasticity are stated. Their basis are ideas of instability. Using own researches and known experimental data was shown, that the reason of the metals plasticity is instability of a crystal lattice.

On the two-dimensional model of the crystal it was shown that the crystal lattice of infinite size can be unstable under influence of small shear deformation in specific conditions. It was found that the reason 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 modelling crystal 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, when its thermal energy atoms is zero or very small. The increase of thermal energy can change it to the stable one. The process of crystal stability breaking under the influence of external forces can be considered as the plasticity. The displacement group of atoms into position of lower potential energy is presented as the elementary stage of plastic deformation