

УДК 541.183

ДОСЛІДЖЕННЯ НЕСТІЙКОСТІ КРИСТАЛІЧНОЇ ГРАТКИ НА ДИСКРЕТНИХ МОДЕЛЯХ

Л. Ю. КОЗАК

Івано-Франківський державний технічний університет нафти і газу

На двовимірній дискретній моделі встановлено, що за відповідних умов кристалічна ґратка переходить у стан нестійкої рівноваги. У такій ґратці атоми знаходяться у положенні, що не відповідає їх мінімальній енергії, тому за дії незначних зсувних деформацій атоми ґратки переміщуються в інше положення, де їхня потенціальна енергія нижча. Стан нестійкої рівноваги кристалічної ґратки обумовлює її високу пластичність. Розрахунки показали, що міцність кристалів з такою ґраткою залежить від їх поперечного розміру.

Ключові слова: кристалічна ґратка, міжатомна взаємодія, сферично-симетричний потенціал, стан нестійкої рівноваги, зсув атомних площин.

Раніше [1–3] показано, що двовимірна кристалічна ґратка за високих температур, близьких до температури плавлення, перебуває в стані стійкої рівноваги. Зі зниженням температури кристалічна ґратка зі сферично-симетричним потенціалом міжатомної взаємодії переходить у стан нестійкої рівноваги (метастабільний стан), що пов'язано зі зміщенням атомів у положення, що не відповідає їх мінімальній потенціальній енергії. У такій кристалічній ґратці під дією незначних зовнішніх зусиль атоми переміщуються в положення з мінімальною потенціальною енергією. При цьому зміщення атомів можливе тільки за їх одночасного зсуву атомними площинами за деякими кристалографічними густо заселеними атомами напрямками, а також за умови, що кристалічна ґратка є безмежних розмірів. У реальних кристалах слід враховувати вплив поверхні на опір зсуву атомних площин.

Мета роботи – обчислити затрати енергії на зсув атомних площин з урахуванням опору зсуву поверхневих атомів для кристалів, в яких кристалічна ґратка перебуває в стані нестійкої рівноваги (СНР).

Методичні аспекти досліджень. Використали методику, яку застосовували раніше [1–3]. Досліджували двовимірну кристалічну ґратку з квадратною коміркою (рис. 1). Сили міжатомної взаємодії описували сферично-симетричним потенціалом, що поширювався на перших та других сусідів атома. Дію сил обмежували відстанню $r = 2r_0$, де r_0 – рівноважна відстань між атомами у двохатомній моделі твердого тіла.

Енергію зв'язку між двома атомами визначали з рівняння [4]

$$U = \frac{Am}{r_0^{m+1}} \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{m+1} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{n+1} \right]. \quad (1)$$

Оскільки розрахунки виконували для встановлення якісних характеристик моделі, то дані у рівнянні (1) вибрані довільно, але близькими за величинами, властивими для реальних кристалів: $A = 1$; r – відстань між атомами; $m = 1$ та $n = 8$ – показники степеня для енергії сил притягання і відштовхування, відповідно, $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$ – рівноважна відстань, коли досягається мінімальна потенціальна енергія.

Контактна особа: Л. Ю. КОЗАК, e-mail: lub53@ukr.net

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

$$E_c = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N U(\bar{r}_i - \bar{r}_j), \quad (2)$$

де $U(\bar{r}_i - \bar{r}_j)$ – енергія взаємодії пари атомів з координатами r_i і r_j .

Міжатомну відстань визначали з умови мінімальної потенціальної енергії кристала. Розрахунки для кристалів, утворених різною кількістю атомів, свідчать про зменшення міжатомної відстані зі збільшенням їх розміру [3]. Мінімальна міжатомна відстань є віддаль для кристала безмежних розмірів $r_1 = 2,34 \text{ \AA}$, тоді як рівноважна міжатомна відстань парної взаємодії атомів $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$. Подібні розрахунки для кубічної кристалічної ґратки свідчать про ще більше зменшення міжатомної відстані – $r_1 = 2,23 \text{ \AA}$.

Кристал розглядали як двофазну систему [5, 6], яка складається з внутрішніх областей кристалічної ґратки ідеальної будови і поверхневих шарів. Внутрішні атоми перебувають у стані нестійкої рівноваги, тому за зсуву атомних площин опір відсутній [1–3]. За зсуву атомів поверхневих шарів виникає опір, оскільки вони переважно займають стійкі положення. Це обумовлено тим, що поверхневі шари відрізняються за будовою від внутрішніх областей кристала [7–14].

Затрати енергії на зсув поверхневого атома визначали за схемою, показаною на рис. 1. Потенціал міжатомної взаємодії поверхневих атомів приймали таким, як і для внутрішніх областей кристалічної ґратки. Товщина поверхневого шару становила два атоми. Загалом товщина поверхневого шару може бути суттєво більшою, особливо у великих за розміром кристалах [9, 10].

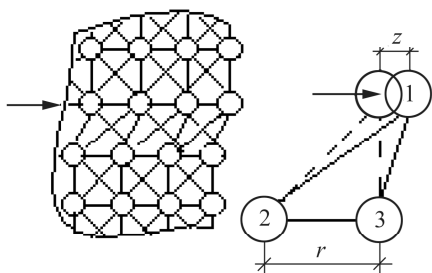


Рис. 1. Fig. 1.

Рис. 1. Схема розрахунку енергії зсуву поверхневого атома.

Fig. 1. The scheme of the surface atom energy shift calculation.

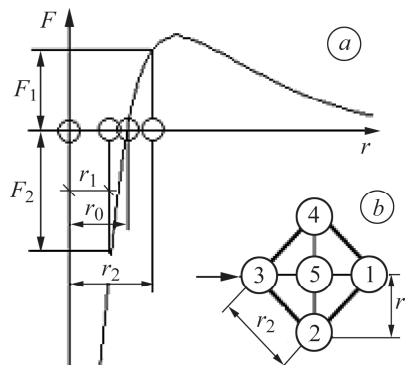


Рис. 2. Fig. 2.

Рис. 2. Залежність сили F взаємодії атомів від відстані r (a) та п'ятиатомна модель кристала (b).

Fig. 2. The dependence of atoms force F interaction on distance r (a) and five-atomic model of crystal (b).

Стан нестійкої рівноваги кристалічної ґратки. Розглянемо механізм переходу кристалічної ґратки у стан нестійкої рівноваги під час зниження температури від температури кристалізації до 0 К на п'ятиатомній моделі кристала (рис. 2b). На рис. 3a наведено результати розрахунку потенціальної енергії атома 5 за його взаємодії з сусідами та потенціальної енергії кристала E_c (рис. 3b) за температури 0 К залежно від міжатомної відстані r . Для цих розрахунків рівноважна відстань парної взаємодії двох атомів становить $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$.

Зниження температури обумовлює зміщення атомів від їхніх початкових положень, які відповідають їх мінімальній потенціальній енергії (рис. 3a) за відстані між атомами 2,5 Å до 2,34 Å при 0 К. При цьому потенціальна енергія атома 5 зростає на ΔU_1 , а енергія п'ятиатомної моделі знижується на ΔU_2 (рис. 3b). Зростання потенціальної енергії атома 5 зі зниженням температури є свідченням переходу у СНР.

Виникнення СНР обумовлено сферичною симетрією потенціалу міжатомної взаємодії, в результаті якої у кристалічній ґратці між атомами і їх найближчими сусідами виникають сили відштовхування, які зрівноважуються силами притягання між атомами і їх іншими сусідами.

У п'ятиатомній моделі (рис. 2b) між внутрішнім атомом 5 і периферійними атомами 1, 2, 3, 4 виникають сили відштовхування F_2 , оскільки $r_1 < r_0$, де $r_0 = 2,5$ Å (рис. 2b), які зрівноважуються силами притягання F_1 , що виникають між периферійними атомами, оскільки відстань між ними більша рівноважної – $r_2 > r_0$. Це є характерним і для кристалів, що складаються з багатьох атомів.

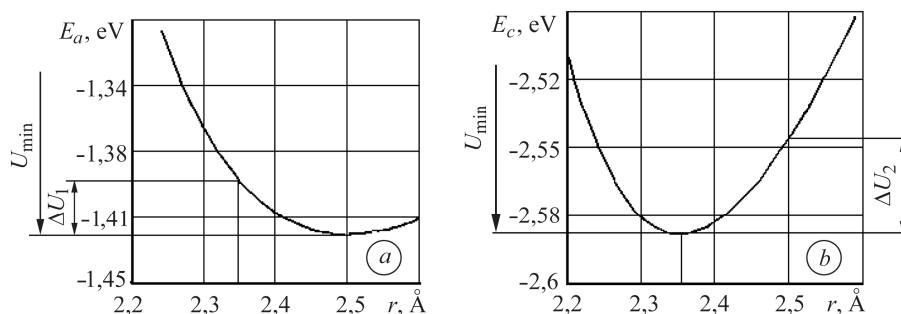


Рис. 3. Залежність потенціальної енергії атома 5 E_a (a) і кристала E_c (b) від відстані між атомами r .

Fig. 3. Dependence of atom 5 potential energy E_a (a) and crystal E_c (b) on distance r between the atoms.

Отже, стан нестійкої рівноваги ідеальної кристалічної ґратки є тоді, коли атоми знаходяться у положенні, що не відповідає їхній мінімальній потенціальній енергії. Внаслідок дії незначних зовнішніх сил атоми переміщуються в положення з мінімальною енергією – це пластична деформація.

Слід відмітити, що у стані нестійкої рівноваги знаходяться атоми твердих тіл під час поліморфних перетворень [1] і дії високого гідростатичного тиску [15].

Визначення затрат енергії на зсув атомної площини у двовимірних кристалах. Отже, внутрішні області кристалічної ґратки ідеальної будови за температури значно нижчої від температури кристалізації перебувають у СНР (рис. 4a). Така кристалічна ґратка під дією незначних зовнішніх зусиль втрачає стійкість [3] і атомні площини зміщуються на відстань менше міжатомної (рис. 4b) – це двійникування. Однак за інерцією атомні площини можуть переміститись на кілька міжатомних відстаней – це ковзання. Який з цих двох механізмів відбуватиметься, залежатиме від рельєфу потенціальної енергії ґратки і швидкості розсіювання енергії [16]. При цьому атоми переміщуються в стійкіше положення і утворюють нову стійку структуру, якій властивий уже високий опір зміщенню атомів подібно, як і у поверхневих шарах.

У реальних кристалах поверхня забезпечує стійкість кристалічної ґратки. Це врахували під час розрахунку опору зсуву.

Затрати енергії для зміщення атомних площин визначали як різницю між потенціальною енергією атомів перед зміщенням $E(0)$ і потенціальною енергією атомів $E(z)$ після їх зміщення – $dE = E(z) - E(0)$.

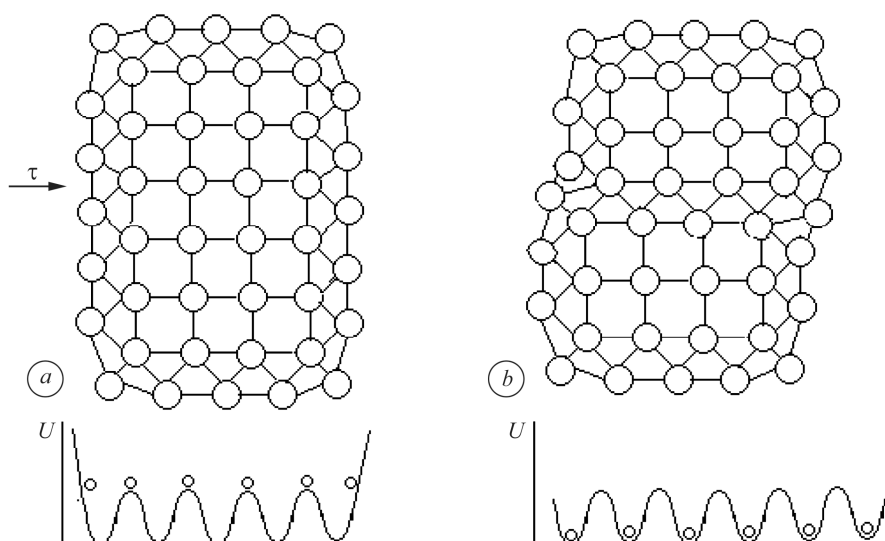


Рис. 4. Кристал до (а) і після (б) зсуву атомної площини. U – потенціальна енергія.
 Fig. 4. The crystal before (a) and after (b) shear of the atomic plane. U is potential energy.

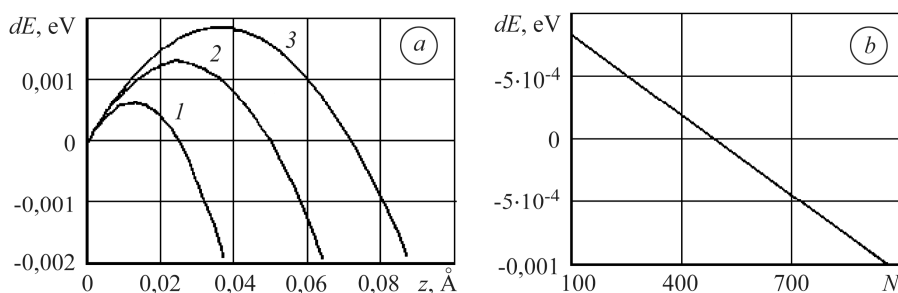


Рис. 5. Затрати енергії на зсув атомної площини у двовимірних кристалах залежно від зміщення z (для різної кількості атомів N у перерізі кристала: 1 – 200; 2 – 100; 3 – 70 атомів) (а) та кількості атомів у перерізі кристала за зміщення $z = 0,01 \text{ \AA}$ (б).

Fig. 5. The energy expenditure for shear of atomic plane in two-dimensional crystals depending on the offset z (for different number of atoms N in the cut of a crystal: 1 – 200; 2 – 100; 3 – 70 atoms) (a) and the number of atoms in the cut of a crystal at offset $z = 0.01 \text{ \AA}$ (b).

У кристалах за зміщення атомної площини затрати енергії на зсув спочатку зростають, а після досягнення максимуму – знижуються (рис. 5а). Максимум на кривих залежності енергії від зсуву атомної площини розділяє деформацію на дві області – стійку і нестійку. У стійкій області для зміщення атомної площини необхідне зовнішнє зусилля. Якщо зусилля зняти, то система повернеться у початкове положення – це зона пружних деформацій. Зміщення атомної площини поза максимумом на кривих 1–3 відповідає незворотній (пластичній) деформації. Більші затрати енергії на зсув атомної площини властиві для кристала меншої ширини (70 атомів) (рис. 5а, крива 3), а менші – для кристала шириною у 200 атомів (рис. 5а, крива 1).

Затрати енергії на зсув атомної площини знижуються зі зростанням товщини кристала (рис. 5б), а для тонких кристалів є додатні, що свідчить про їх високу стійкість і міцність. Збільшення розміру кристала призводить до зниження енергії зсуву і за ширини близько 500 атомів ця енергія знижується до нуля і нижче. Від’ємні значення енергії означають, що опір зсуву атомних площин відсутній.

Отже, великі за розміром кристали нестійкі відносно малих зсувних деформацій. Це пояснює відсутність у природі металічних монокристалів великих розмірів і складність їх вирощування в лабораторних умовах.

Одержані результати мають експериментальне підтвердження. Відомо, що висока міцність властива для дуже тонких кристалів – “вусів” (рис. 6). Вона залежить від їх розмірів [17–19]. Висока міцність, близька до теоретичної, характерна для “вусів” дуже малої товщини ($< 5 \mu\text{m}$). Зі збільшенням товщини їх міцність знижується і для товстих “вусів” ($> 50 \mu\text{m}$) співмірна з міцністю звичайних матеріалів. Залежність міцності ниткоподібних кристалів від їх розмірів обумовлена впливом поверхневого шару. Зі збільшенням розміру мікрочасток вплив поверхні зменшується. Штучно вирощені масивні металічні монокристали високої чистоти і досконалої будови мають надзвичайно низький опір зсуву, близький до нуля [20–24].

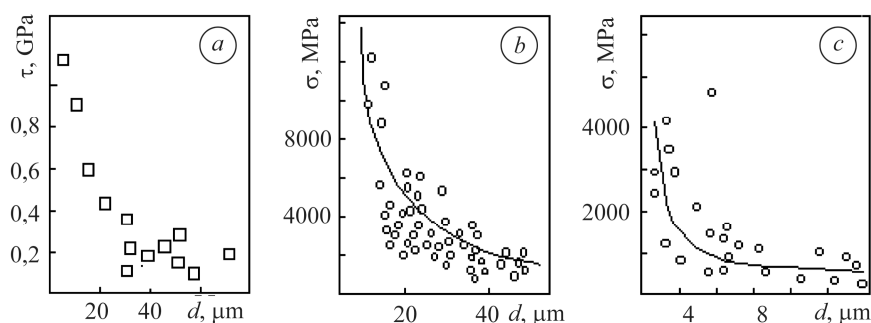


Рис. 6. Залежність напруження зсуву (a) [17] і границі текучості (b, c) [18] від розміру кристалів: a, b – сталь; c – мідь.

Fig. 6. Dependence of shear stress (a) [17] and yield stress (b, c) [18] on crystals size: a, b – steel; c – copper.

ВИСНОВКИ

Кристалічна ґратка твердих тіл зі сферично-симетричним потенціалом між-атомної взаємодії за нормальних умов перебуває у стані нестійкої рівноваги. Це означає, що атоми в такій ґратці є у положенні, що не відповідає їх мінімальній потенціальній енергії. Виникнення стану нестійкої рівноваги обумовлено сферичною симетрією потенціалу міжатомної взаємодії. В результаті такої взаємодії кристалічна ґратка є стиснутою, а між атомами і їх найближчими сусідами діють сили відштовхування, які врівноважуються силами притягання, що виникають між атомами і їх іншими сусідами. У такій ґратці відсутні енергетичні затрати на зсув атомних площин, оскільки під дією малих зсувних деформацій вона втрачає стійкість, внаслідок чого атоми переміщуються в положення з нижчою потенціальною енергією. У реальних кристалах досконалої будови і високої чистоти опір зсуву атомним площинам створюють поверхневі атоми. Тому міцність кристалів залежить від їх розмірів і може змінюватись в широкому діапазоні – від максимальної, близької до теоретичної, для тонких кристалів “вусів”, до мінімальної, близько нуля, для масивних металічних монокристалів.

РЕЗЮМЕ. На двухмерной дискретной модели установлено, что при соответствующих условиях кристаллическая решетка переходит в состояние неустойчивого равновесия. В такой решетке атомы находятся в положении, которое не соответствует их минимальной энергии. В этом случае, при воздействии незначительных сдвиговых деформаций, атомы решетки перемещаются в иное положение с минимальной потенциальной энергией. Состояние неустойчивого равновесия кристаллической решетки обуславливает ее высокую пластичность. Расчеты показали, что прочность кристаллов с такой решеткой зависит от их поперечного размера.

SUMMARY. Using the two-dimensional discrete model it is established that under the appropriate conditions the crystal lattice transforms into the state of unstable equilibrium. Atoms

in this lattice exist in position that does not correspond to their minimum energy. In case of negligible shear deformations lattice atoms move to another position with lower potential energy. The unstable equilibrium state of the crystal lattice leads to its high plasticity. The calculations show that the strength of crystals with such a crystal lattice depends on their size.

Автор висловлює вдячність професору Цирульнику О. Т. за участь у обговоренні матеріалів статті і цінні зауваження.

1. Козак Л. Ю. Дискретні моделі мартенситного перетворення та двійникування в металах // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2012. – **48**, № 5. – С. 83–87.
(Kozak L. Yu. Discrete models of martensitic transformation and twinning in metals // Materials Science. – 2013. – **48**, № 5. – P. 647–652.)
2. Козак Л. Ю. Комп'ютерне моделювання впливу температури на стійкість двовимірної кристалічної ґратки // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1999. – **35**, № 6. – С. 119–120.
(Kozak L. Yu. Computer simulation of the influence of temperature on the stability of a two-dimensional crystal lattice // Materials Science. – 1999. – **35**, № 6. – P. 896–898.)
3. Козак Л. Ю. Комп'ютерне моделювання зсуву атомної площини в двовимірній кристалічній ґратці // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1999. – **35**, № 1. – С. 114–115.
(Kozak L. Yu. Computer simulation of shifts of an atomic plane in a two-dimensional crystal lattice // Materials Science. – 1999. – **35**, № 1. – P. 132–135.)
4. Полухин П. И., Горелик С. С., Воронцов В. К. Физические основы пластической деформации. Уч. пос. для ВУЗов. – М.: Металлургия, 1982. – 584 с.
5. Гуткин М. Ю., Овидько И. А. Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов // Электронный ресурс. – Режим доступа до ресурсу: <http://www.ipme.ru/ipme/labs/itdm/ovidko1April2008.html>
6. Архаров Б. И., Скрипка Ю. Г., Мархасин Е. С. О значении механизма формирования межатомных связей в сплавах для их прочностных и пластических свойств // Физ.-хим. механика материалов. – 1978. – № 2. – С. 47–50.
7. Черепанов Г. П. К общей теории разрушения // Физ.-хим. механика материалов. – 1986. – № 1. – С. 36–44.
8. Алехин В. П. Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов. – М.: Наука, 1988. – 280 с.
9. Васильев М. А. Структура и динамика поверхности переходных металлов. – К.: Наук. думка, 1988. – 248 с.
10. Глейтер Г., Чалмерс Б. Большеугловые границы зерен. – М.: Мир, 1975. – 314 с.
11. Latinision R. M., Sedriks A. J., and Westwood A. C. Surface sensitive mechanical behavior of metals // Struct. and Properties Metal Surface. – 1973. – P. 500–538.
12. Особенности упрочнения металлических и неметаллических нитевидных монокристаллов / С. З. Бокштейн, С. Т. Кишкин, М. П. Назаров и др. // Физика деформационного упрочнения монокристаллов. – К.: Наук. думка, 1972. – 268 с.
13. Кузнецов В. Д. Поверхностная энергия твердых тел. – М.: ГИТТЛ, 1954. – 218 с.
14. Лихтман В. И., Ребиндер П. А., Карпенко Г. В. Влияние поверхностно-активной среды на процессы деформации металлов. – М.: Из-во АН СССР, 1954. – 204 с.
15. Козак Л. Ю. Дискретні моделі пластичної деформації твердих тіл під впливом високого гідростатичного тиску // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2016. – **52**, № 1. – С. 98–101.
(Kozak L. Yu. Discrete models of plastic deformation of solids under the action of high hydrostatic pressure // Materials Science. – 2016. – **52**, № 1. – P. 108–112.)
16. Козак Л. Ю. Пластичність металів і нестійкість кристалічної ґратки. – Івано-Франківськ: Факел, 2004. – 146 с.
17. Wojarski Z. and Wokulski Z. Badania wiskerow zelaza w statycznej probie rozciagania // Arch. hutn. – 1980. – **1**. – P. 3–26.
18. Гольдштейн М. И., Литвинов В. С., Бронфин Б. М. Металлофизика высокопрочных сплавов. – М.: Металлургия, 1986. – 390 с.
19. Козак Л. Ю. Механічні властивості ниткоподібних кристалів // Фізика і хімія твердого тіла. – 2001. – **2**, № 4. – С. 691–697.
20. Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. – Ленинград: Наука, 1972. – 424 с.
21. Миркин Л. И. Физические основы прочности и пластичности. – М.: МГУ, 1968. – 538 с.
22. Шмидт Е., Боас В. Пластичность кристаллов в особенности металлических. – Л.; М., 1938. – 298 с.
23. Брэгг У. Г., Брэгг У. Л. Кристаллические состояние. – М.: НТИ СССР, 1938. – 336 с.
24. Карпентер Гарольд. Металлический кристалл // Успехи физических наук. – 1930. – **10**, № 5. – С. 689–718.

Одержано 03.01.2017

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРІВ

Міжнародний двомісячний журнал “Фізико-хімічна механіка матеріалів”, який перевидає англійською мовою видавництво Springer Verlag під назвою “Materials Science”, друкує результати досліджень та оглядові праці у галузі міцності та довговічності конструкційних матеріалів, охоплюючи механіку руйнування, зокрема з урахуванням робочих умов, та суміжні ділянки матеріалознавства, фізики і хімії. Окремі рубрики присвячені зміцнювальним технологіям, методам захисту від корозії (інгібітори, покриття тощо), інженерії поверхонь і оптимізації структури, а також діагностиці та неруйнівному контролю елементів конструкцій.

Журнал публікує статті українською, російською та англійською мовами.

Вимоги до оформлення статті

1. Назву статті (**не більше двох рядків**) слід подати трьома мовами.
2. Обсяг статей (крім оглядових) разом з таблицями, рисунками та підписами до них і списком літератури не повинен перевищувати 12 тис. знаків (6 сторінок) шрифтом Times New Roman 10,5п з полуторним інтервалом.

3. Стаття повинна містити **ключові слова**, стислий виклад стану проблеми, опис предмета, мети і методу досліджень, результати та їх обговорення, висновки, за винятком коротких повідомлень обсягом не більше трьох сторінок.

4. **Резюме англійською, українською та російською мовами** до 20 рядків повинні містити **конкретні результати** і починатися словами “отримано...”, “показано...”.

5. На рисунках не повинно бути словесних позначень. У тексті статті вказують місце рисунка. **Підписи пишуть мовою оригіналу та англійською**. Англійський підпис мусить повністю пояснити, що зображено на рисунку. Рисунки, по змозі, роблять однакових розмірів, а їх ширина не має перевищувати 6 см. Подібні рисунки об’єднують у групи (Рис. *Xa, b, c, ...*). Рисунки, які у статті не аналізують і не використовують для наукових висновків, не поміщати. Не можна дублювати ті самі дані в таблицях, графіках і тексті статті, а також підписи під рисунками у тексті.

6. Для позначення величин вживати літери тільки латинської та грецької абеток. Всі символи треба пояснити в тексті. Не застосовувати індекси у вигляді початкових літер якогось слова, а замінити їх на цифри (наприклад, a_0 замість $a_{\text{поч.}}$). Номер формули вказують, якщо **на ній далі є посилання**.

7. Фізичні величини подають в одиницях СІ, користуючись міжнародними позначеннями.

8. Цитовану літературу треба обмежити тільки найважливішими працями. Список літератури подають у порядку посилання в статті **мовою оригіналу** (можна дублювати англійською мовою), як указано нижче.

Мазурак Л. П., Бережницький Л. Т., Качур П. С. Пружна рівновага ізотропних тіл із криволінійними вклученнями // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1998. – № 6. – С. 21–31.

Ang H. E. and Gao Y. L. Strength prediction of unidirectional composites with a circular hole // Int. J. of Fracture. – 1992. – **56**, № 2. – Р. 23–29. (*Для журнальних статей*).

Кортен Х. Т. Механіка розрушення композитов // Разрушение / Под ред. Г. Либовица. – М.: Мир, 1976. – Т. 5. – С. 367–471.

Speidel H. J. C., Uggowitzer P. J. and Speidel M. O. Properties of cold worked high-nitrogen chromium based alloys // 5th Int. Conf. on High Nitrogen Steels (Espoo, Finland, May, 24–26, 1998). – Stockholm, Sweden, 1998. – Р. 124. (*Для статей у збірнику*).

Похмурський В. І., Федоров В. В. Вплив водню на дифузійні процеси в металах. – Львів: Вид. ФМІ НАН України, 1998. – 208 с. (*Для монографій*).

9. Обсяг огляду та літературу до нього можна збільшити залежно від тематики та інформативності.

Разом із двома видруками в редакцію подають коп’ютерну версію статті, підготовлену в редакторі Word for Windows 2003 або XP, та рисунки у форматах *.tif або *.cdr (лише в чорно-білому виконанні). Статтю передають на CD диску або Е-поштою: pсmm@ipm.lviv.ua (надсилати як attachment).

10. До статей додають дані про авторів (ПІБ повністю (трьома мовами), № телефону, Е-пошту), а також назву й адресу установи, в якій виконано роботу, і вказують контактну особу.

Статті, не оформлені за цими правилами, редакція не розглядатиме.

Докладнішу інформацію можна отримати телефоном: (032) 263-73-74.

E-mail: pсmm@ipm.lviv.ua