

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И РЕАЛЬНАЯ ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ: ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИЧИНЫ РАСХОЖДЕНИЯ*

Ю.А. Хон

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

В рамках существующих теорий зарождение пластического сдвига и зародышевых трещин в совершенных кристаллах возможно лишь при деформирующем напряжении, близком к теоретической прочности. В работе показано, что совершенный кристалл, рассматриваемый как открытая система ядер и электронов, теряет свою устойчивость при величине приложенных напряжений, на порядки меньших теоретической прочности. При этом привлекать представления о наличии в объеме и в поверхностном слое кристалла дефектов различного типа не требуется. Причиной неустойчивости является возбуждение динамических смещений, определяемых неадиабатическими переходами атомов Ландау – Зинера между пересекающимися поверхностями потенциальных энергий в открытых неравновесных системах. Дано качественное объяснение наблюдаемым экспериментально результатам.

Ключевые слова: кристалл, деформация, теоретическая прочность, дефекты, адиабатическое приближение, неадиабатическая динамика атомов, динамическая неустойчивость, структурная релаксация.

Введение

В физике прочности и пластичности широко распространено представление о теоретической прочности [1]. Под этим термином понимается величина деформирующего напряжения σ_{th} , при котором характерное для кристалла распределение атомов, становится неустойчивым относительно малых смещений [2]. Как известно, при сдвиговой деформации величина $\sigma_{th} \approx 0.1 \mu$ (μ – модуль сдвига). Соответствующая величина деформации $\epsilon_{th} \approx 0.1$. Разрушение кристалла при одноосном растяжении должно наступать при $\epsilon_{th} \approx 1$ и $\sigma_{th} \approx E$ (E – модуль Юнга). Экспериментально наблюдаемые значения $\sigma_{re} \ll \sigma_{th}$ при всех видах деформации. Такое существенное различие между теоретической и реальной прочностью кристаллов обычно объясняется наличием в кристалле дефектов кристаллического строения. Так, разрушение кристалла принято объяснять наличием в поверхностном слое докритических трещин (зародышей трещин). Под действием приложенных сил их длина может превысить критическое значение, что приводит к разрушению [3]. При моделировании процесса разрушения на различных пространственных и временных масштабах существование докритических и закритических трещин предполагается с самого начала [4–6]. Пластическое течение кристаллов при $\sigma > \sigma_{re}$ связывается с существующими в кристалле источниками дислокаций. Важная роль имеющихся в кристаллах дефектов в процессах пластической деформации и разрушения кристаллов надежно установлена и сомнению не подлежит. В качестве аргумента в пользу представлений о теоретической прочности часто приводятся данные о повышении величины σ_{re} при уменьшении толщины нанопроволок [1].

Такая аргументация вызывает сомнения. Во-первых, само понятие теоретической прочности получено для **бесконечной кристаллической** решетки с заданными потенциалами межатомного взаимодействия [2]. Во-вторых, процессы пластической деформации и разрушения начинаются со свободной поверхности, либо с внутренних границ раздела. И обобщение критерия потери устойчивости на нанокристаллы требует своего обоснования. Вместе с тем в экспериментах *in situ* [7] на фольгах толщиной 0.1 мм показано, что зародышевые трещины в виде канавок на первоначально плоской поверхности Ge отсутствуют и образуются при нагрузке $\sigma_0 \approx 100$ МПа. Их глубина и ширина достигают тысячи нанометров. После разгрузки канавки исчезают, поверхность вновь становится плоской. При нагрузке $(\sigma - \sigma_0)/\sigma_0 \ll 1$ образец разрушается. Другими словами, процесс образования докритических трещин при деформации не определяется наличием каких-либо крупномасштабных дефектов поверхности, а отражает особенности динамики атомов в деформируемом кристалле как системе ядер и электронов. Возникает вопрос о происхождении этих особенностей и определяемой ими реальной прочностью кристаллов. Ответ на данный вопрос дается ниже.

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2021-0011.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>