

PACS numbers: 62.20.Dc, 62.20.Mk, 65.40.De, 65.70.+y, 65.80.+n, 68.35.Md

Концепция критической плотности энергии в моделях разрушения твердых тел

Ю. Я. Мешков

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины
Украина, 03680 Киев-142, бульв. Академика Вернадского, 36*

В работе развивается новая энергетическая концепция разрушения твердых тел (ТТ), основанная на критериях критической плотности упругой энергии в очаге разрушения p_c , для трех масштабных уровней процесса — атомного, микроскопического и макроскопического. В обосновании критериев положена эмпирически наблюдаемая закономерность о пропорциональном соотношении между приращениями объема ТТ и потенциальной энергии межатомных связей при механическом растяжении (в нелинейной области упругих деформаций) и тепловом нагревании твердых тел. Коэффициентом пропорциональности является параметр плотности энергии межатомных связей $p_0 = Q_c/V_0$ (Q_c — энергия сублимации, V_0 — молярный объем при 0 К). Эта закономерность названа принципом сохранения плотности потенциальной энергии в приращенном объеме (ПСППЭ), исходя из которого в работе получены простые соотношения для вычисления целого ряда фундаментальных механических и тепловых характеристик — коэффициента термического расширения, модулей Юнга, сдвига и всестороннего сжатия, энергии сублимации, предельной (теоретической) прочности на отрыв и сдвиг, постоянной Грюнайзена, поверхностной энергии и др. Все критерии критической плотности энергии содержат константу p_0 и в частном случае материала, содержащего предельно острые нанотрешины, приводят к критерию, аналогичному критерию Гриффитса, однако с уточненным (в 6 раз большим) показателем энергозатрат, достаточных для образования свободной поверхности. Показано, что новый критерий является единым для разрушения как идеально хрупких тел, так и для квазихрупких материалов, чем принципиально отличается от классического критерия Гриффитса.

В роботі розвинуто нову енергетичну концепцію руйнування твердих тіл (ТТ), що базується на критеріях критичної густини пружної енергії в джерелі руйнування p_c , яка різниться для трьох масштабних рівнів процесу

— атомного, мікроскопічного та макроскопічного. Обґрунтуванням цих критеріїв служить емпірична закономірність пропорційної залежності між приростами об'єму ТТ і потенційної енергії міжатомних зв'язків при механічному розтягу (поза межами лінійної області пружних деформацій) і тепловому нагріванні ТТ. Коефіцієнтом пропорційності є параметр густини енергії міжатомних зв'язків $p_0 = Q_c/V_0$ (Q_c — енергія сублимації, V_0 — молярний об'єм при 0 К). Цю закономірність названо принципом збереження густини потенційної енергії у надлишковому об'ємі (ПЗГПЕ), виходячи з якого в роботі отримано прості співвідношення для вираховування цілого ряду фундаментальних механічних і теплових характеристик — коефіцієнту термічного розширення, модулів Юнга, зсуву і всебічного стиску, енергії сублимації, граничної (теоретичної) міцності на відрив і зсув, постійної Грюнайзена, поверхневої енергії тощо. Всі критерії густини енергії мають в собі константу p_0 і для матеріалу, що містить ідеально гострі нанотріщини набувають вигляду критерію, аналогічного критерію Гриффітса, проте з уточненим (в 6 разів більшим) показником енерговитрат, які є достатніми для утворення вільної поверхні тіла. Показано, що новий критерій є єдиним для руйнування як ідеально крихких тіл, так і квазікрихких матеріалів, чим принципово відрізняється від класичного критерія Гриффітса.

New energy conception of both solid's fracture based on criteria of critical density of elastic energy, p_c , in fracture nuclei and three scale levels of the process, viz. atomic, microscopic and macroscopic ones, is developed in a given paper. Empirically observed regularity—the proportionality between increments of solid volume and potential energy of interatomic bonds at mechanical tension (in non-linear area of elastic deformations) and heating of solids—gives rise to these criteria. Parameter of density of interatomic-bond energy, $p_0 = Q_c/V_0$ (where Q_c is the sublimation energy, V_0 is the molar volume at 0 K), is a proportionality coefficient. This regularity is called as 'the principle of constancy of density of potential energy within increment volume' (PCDPE). On the basis of this principle, simple relations for calculation of a whole series of fundamental mechanical and thermal characteristics such as thermal-expansion coefficient, Young's modulus, shear modulus, uniform (triaxial) compression modulus, sublimation energy, theoretical (ultimate) tearing and shearing strength, Grüneisen parameter, surface energy, etc. were obtained. All criteria of the critical density of energy include the constant p_0 , and in specific case of material with atomically-sharp nanocracks, result in criterion similar to the Griffith's one, but with a more precise (6 times greater) sufficient value of specific energy of the free-surface formation. It is shown that this new criterion is common for fracture in perfectly brittle solids as well as in quasi-brittle materials, and thereby substantially differs from classical Griffith's criterion.

Ключевые слова: энергия связи, объем атома, плотность энергии, упругие модули, предельная прочность, критерий разрушения.

(Получено 13 июня 2000 г.; окончат. вариант — 21 сентября 2000 г.)

СОДЕРЖАНИЕ

- Вступление
- 1. Разрушение идеальных кристаллов
 - 1.1. Принципы сохранения плотности потенциальной энергии
 - 1.2. Некоторые следствия из принципа сохранения плотности энергии
 - 1.3. Поверхностная энергия твердых тел
 - 1.4. Теоретическая прочность на отрыв
 - 1.5. Теоретическая прочность на сдвиг
- 2. Разрушение твердых тел
 - 2.1. Энергетическая модель Гриффитса
 - 2.2. Концепция критической плотности энергии в моделях разрушения твердых тел и металлических материалов
 - 2.3. Основы физической природы прочности металлов и сплавов
- Заключение
- Литература

ВСТУПЛЕНИЕ

Энергетическая концепция разрушения твердых тел впервые выдвинутая А. Гриффитсом в 20-х годах прошлого века [1] оказалась не только революционным шагом в науке о прочности материалов, но и послужила первой серьезной попыткой создания микромодели механизма разрушения с использованием физического параметра, отражающего прочность межатомных связей в твердом теле (ТТ) — поверхностной энергии γ . На этом основании А. Гриффитса вполне заслуженно считают если не основателем физики прочности, то во всяком случае первопроходцем, наметившим ясную связь между подходами континуальной механики напряженного состояния тел с трещинами и атомистической природой критерия их предельного состояния [2]. И хотя сам критерий Гриффитса нашел весьма ограниченное применение в механике разрушения лишь для описания разрушения идеально хрупких тел (типа стекол, гранитных пород и т. п.) все же в его работе [1] впервые была высказана основополагающая мысль о том, что причина огромного различия между теоретической прочностью межатомных связей и лабораторной прочностью испытываемых материалов обусловлена присутствием в хрупких материалах множества микроскопических идеально острых трещин, на кончиках которых благодаря концентрации напряжений достигаются усилия, обеспечивающие разрыв весьма прочных межатомных связей. Эти субмикроскопические трещины вполне заслуженно получили название гриффитсовских и поныне лежат в основе физического понимания природы прочности металлических материалов, а главной задачей физики прочности с тех пор стало обоснование меха-

низма зарождения таких субмикротрещин и вычисление их размеров в связи с размерами элементов структуры поликристаллических металлов — размерами зерен матрицы и разнообразных частиц второй фазы в сплавах [3, 4, 5].

Сама идея энергетического баланса в концепции А. Гриффитса в последующие годы не только не была подвергнута сомнению, но и получила дальнейшее развитие и обобщение в виде известных критериев линейной и нелинейной механики разрушения, впечатляющие итоги и достижения которых были продемонстрированы в докладах ведущих специалистов в этой области на 8-ом Всемирном конгрессе по механике разрушения (МКР-8) в 1993 г., посвященном 100-летию со дня рождения А. Гриффитса [6].

Несмотря на это, в свете современных подходов к пониманию механизма разрушения твердых тел к критерию Гриффитса можно предъявить некоторые претензии — во-первых, действительно ли величина поверхностной энергии γ является достаточной мерой энергозатрат, необходимых для появления свободной поверхности тела после ее разрыва; во-вторых, и это связано с первым обстоятельством, в энергетическом балансе Гриффитса нет элементов физического механизма разрушения, т. е. физической модели разрушения тела, а есть только его очевидный результат — поверхностная энергия γ . Иллюстрацией первого из указанных обстоятельств служат настоячивые попытки Дж. Нотта отыскать численную поправку к величине γ в формуле Гриффитса в виде множителя величиной ~ 6 для лучшего соответствия ее с опытом на металлических сплавах [6]. Второе обстоятельство — отсутствие конкретного физического механизма разрушения в модели Гриффитса, имело более серьезные последствия для физики разрушения металлов, т. к. позволило дальнейшим разработчикам [7, 8] формально расширить сферу применения критерия Гриффитса к задаче разрушения не хрупких, а квазихрупких и даже вязких материалов, введя в качестве меры энергозатрат, сопутствующих разрушению, не идеальную поверхностную энергию γ , а так называемую «эффективную поверхностную энергию» $\gamma_{эфф}$, включающую кроме γ еще и дополнительную работу пластической деформации в окрестности вершины трещины, величину на порядки превышающую γ : $\gamma_{эфф} \gg \gamma$. Тем самым критерий Гриффитса потерял конкретное физическое содержание и приобрел сугубо качественный, эмпирический смысл.

Отмеченное выше можно рассматривать как некие признаки своеобразного кризиса концепции Гриффитса, выход из которого можно было бы найти на путях разработки детального физического механизма разрушения, базирующегося на представлении об условиях разрыва атомно-молекулярных связей в твердых телах.

Отметим сразу же, что попытки построить силовую модель разрыва межатомных связей встречают естественные и очевидные затруднения при применении к дискретным атомистическим системам

таких сугубо континуальных понятий как напряжение σ , теоретическая прочность $\sigma_{теор}$, а также необходимость как-то учитывать индивидуальную подвижность каждого атома относительно его соседей, что проявляется в таком не очень ясном понятии, как жесткость атома или жесткость атомных связей [9].

Поэтому нам представляется более продуктивным строить не силовую, а энергетическую модель процесса (что, собственно, и сделал А. Гриффитс), где понятие энергии атома может иметь вполне определенный физический смысл и однозначную меру своей величины. Однако, в отличие от А. Гриффитса, который в рамках работы энергетического баланса должен был считать всю упругую энергию, аккумулированную в вершине трещины $W_{упр}$, а затем учитывать ее изменение по мере роста трещины, мы считаем разумным рассматривать задачу в терминах объемной плотности упругой энергии, одинаково применимой как в макро- так и в микро-, и даже в атомных масштабах.

Использование энергетической концепции модели разрушения на основе параметра плотности энергии представляется целесообразным по ряду причин: 1) критерий предельного состояния решетки в момент ее разрушения является однопараметрическим, основанном на критическом значении плотности энергии в очаге разрушения; 2) критическое значение плотности энергии может быть однозначно и с достаточно высокой точностью охарактеризовано с помощью параметра плотности энергии межатомных связей в решетке ρ_0 , который является фундаментальной константой материала:

$$\rho_0 = \frac{Q_c}{V_0} \quad (1)$$

где Q_c — энергия сублимации ТТ, Дж/моль. V_0 — объем грамм-моля вещества, $V_0 = A/D$ при $T = 0$ К, где A — атомный (молекулярный) вес, D — плотность, г/м³.

Ниже будет показано, что использование в критериях разрушения параметра плотности энергии ρ_0 вместо поверхностной энергии γ не только более обоснованно с точки зрения построения последовательно физической модели разрушения, но и дает более точные количественные результаты расчета модели.

Однако, развитие новой энергетической модели разрушения на основе концепции критической плотности энергии потребовало предварительного рассмотрения ряда некоторых фундаментальных закономерностей объемно-энергетических изменений в твердых телах под действием факторов, изменяющих потенциальную энергию межатомного взаимодействия в твердых телах [10]. Речь идет о закономерностях изменения плотности потенциальной энергии межатомного взаимодействия в результате теплового расширения или

упругого механического нагружения кристаллической решетки ТТ.

1. РАЗРУШЕНИЕ ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ

1.1. Принцип сохранения плотности потенциальной энергии

Внешнее тепловое или механическое воздействие на ТТ всегда сопровождается изменением его объема V на определенную величину $\Delta V = V - V_0$, на что затрачивается соответствующая работа равная приросту потенциальной энергии упругодеформированного тела ΔU_n . Естественен вопрос о мере соотношения этих двух величин в условиях разных видов воздействия — теплового и механического.

При нагреве одного моля вещества в интервале температур ΔT выше температуры Дебая затраты тепловой энергии составляют $Q \approx 3R\Delta T$ ($R \approx 8,3$ Дж/(моль·град)), из них прирост потенциальной энергии ΔU_n , равный в среднем приросту кинетической энергии атомов, составит примерно половину этой величины $\approx 3/2(R\Delta T)$. Прирост объема: $\Delta V_m = \alpha_v V_0 \Delta T$. Отношение

$$\frac{\Delta U_n}{\Delta V_m} \approx \frac{3R\Delta T}{2\alpha_v V_0 \Delta T} \quad (2)$$

Легко убедиться путем численных расчетов, что величины отношений в выражениях (1) и (2) практически равны друг другу и составляют, например, для железа ($Q_c = 400 \cdot 10^3$ Дж/моль) величину примерно $56 \cdot 10^9$ Дж/м³ (или 56 ГПа). Вследствие этого мы можем записать равенство:

$$\frac{\Delta U_n}{\Delta V_m} \approx p_0 = \frac{Q_c}{V_0}, \quad (3)$$

откуда с учетом (2) получаем:

$$\alpha_v = \frac{3R}{2Q_c}. \quad (4)$$

Расчет средних значений коэффициентов теплового расширения выше температуры Дебая по формуле (4) хорошо согласуется с экспериментальными данными, взятыми по справочному пособию [11], для широкого круга металлов и веществ, отличающихся своей теплотой испарения (сублимации) на порядки величин (табл. 1). Такое согласие можно рассматривать, в первую очередь, как справедливость сделанного выше предположения в формуле (3) о том, что темп прироста потенциальной энергии ΔU_n с увеличением избыточного объема ΔV_m при нагреве ТТ равен плотности энергии межатомного взаимодействия p_0 при температуре 0 К.

ТАБЛИЦА 1. Сравнение расчетных и экспериментальных значений коэффициента термического расширения

Металл (вещество)	Линейный коэффициент термического расширения, $\alpha_L \cdot 10^6$, град. ⁻¹		Энергия сублимации Q_s , $\frac{\text{кДж}}{\text{Г} \cdot \text{МОЛЬ}}$		Атомный вес A , [11]	Плотность $D, 10^6 \frac{\text{Г}}{\text{М}^3}$ [11]
	расчет по (4)	эксперимент [11]	эксперимент [11]	расчет по (47)		
Al	18	23	231	210	27	2,7
Fe	11,6	12	395	396	56	7,86
Ni	12	13	357	–	59	8,8
Ti	10	9	420	466	48	4,5
Au	11	14	386	410	197	19,3
Cr	5,5	7	756	–	52	7,1
W	4,8	4,5	882	793	184	19,1
V	12	8	357	–	51	5,7
Zn	36,5	30	115	208	65	7,14
Cd	37	30	113	–	112	8,64
Na	38	70	109	82	23	0,97
K	51	80	83	76	39	0,86
Hg*	206	180	61	–	201	14,2
H ₂ O*	260	210	48	46	18	1,0

*Для жидких состояний указан коэффициент объемного расширения $\alpha_v = 3\alpha_L$

Второе не менее важное следствие, вытекающее из хорошего соответствия расчетных по (4) и экспериментальных [11] данных по коэффициентам термического расширения твердых и жидких тел α_v , позволяет сделать принципиально важный для физики твердого тела фундаментальный вывод о том, что ангармонизм силового взаимодействия атомов и молекул не является основной физической причиной теплового расширения твердых и жидких тел, вопреки широко известным классическим представлениям, господствующим в современной научной литературе [12, 13 и др.].

По-видимому, роль ангармонизма в тепловом расширении существенно скромнее и составляет вклад величиной порядка 10% от общего эффекта аналогичного тому, как это имеет место во вкладе ангармонизма в величину теплоемкости ТТ [14]. То есть основной физической причиной теплового расширения есть простое увеличение межатомных (и межмолекулярных) расстояний в материале в соответствии с действием принципа сохранения плотности потенциальной энергии, в силу чего рост избыточного объема пропорциона-

лен увеличению потенциальной энергии межатомных связей, а ангармонизм служит лишь источником сравнительно небольшой добавки к основному эффекту. Видимо, с неучтенным вкладом ангармонизма в формуле (4) можно связать заметное превышение экспериментальных значений α_v над расчетными, особенно существенное для легких металлов типа К и Na (табл. 1).

Кроме теплового расширения в ТТ увеличение объема может происходить также и под воздействием механических напряжений σ , создающих в решетке избыточную энергию упругих деформаций ΔU_σ :

$$\Delta U_\sigma = \frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{E} \quad (5)$$

Для обычных упругих деформаций ε , не выходящих за пределы закона Гука, упругое увеличение объема тела ΔV_σ пропорционально величине σ :

$$\Delta V_\sigma = (1 - 2\nu)\varepsilon \cdot V_0 \quad (6)$$

(ν — коэффициент Пуассона, $\varepsilon = \sigma / E$, E — модуль Юнга). Отношение $\Delta U_\sigma / \Delta V_\sigma$ в этом случае зависит от σ :

$$\frac{\Delta U_\sigma}{\Delta V_\sigma} = \frac{\sigma}{2(1 - 2\nu) \cdot V_0}, \quad (7)$$

что означает, что для механических деформаций решетки в рамках закона Гука изменения потенциальной энергии и объема не пропорциональны и их отношение не является константой из-за линейности соотношения (6). На самом деле при достаточно больших упругих деформациях, когда закон Гука нарушается, в приросте объема и энергии появляются дополнительные члены, обычно их отношение может существенно отличаться от (7).

Именно такая ситуация имеет место в случае упругих искажений решетки, создаваемых дефектами кристаллического строения — дислокациями и вакансиями, в ближайшем окружении которых локальные упругие деформации заведомо выходят за пределы закона Гука. Именно поэтому в процессах аннигиляции дислокаций и вакансий при отжиге сильно наклепанных металлов и сплавов наблюдается практически постоянное соотношение между величинами тепловых (q) и объемных (δV) эффектов, характерное для данного типа металла, хотя и немного отличающееся для разного типа процессов, протекающих при отжиге — для вакансионного отдыха, для полигонизации и рекристаллизации [15].

Будем считать, что тепловой эффект рекристаллизации q_p при отжиге наклепанного металла отражает уменьшение потенциальной

энергии связей в решетке ΔU_n : $\Delta U_n = q_p A$. Уменьшение объема при этом $\Delta V = \delta V_p V_0$. Отношение $\Delta U_n / \Delta V$:

$$\frac{\Delta U_n}{\Delta V} = \frac{q_p A}{\delta V_p V_0} = \frac{q_p D}{\delta V_p} \quad (8)$$

Величина этого отношения по Зегеру–Штелле [16] оценивается приблизительно как $(0,5 \dots 0,8)G$ (G — модуль сдвига). Если принцип сохранения плотности энергии (3) здесь соблюдается, то отношение (8) должно равняться Q_0/V_0 , т. е. $56 \cdot 10^9$ Дж/м³ или 56 ГПа для железа и стали. В действительности экспериментальные значения отношения $q_p D / \delta V_p$, полученные в работах Л. Н. Ларикова и учеников [15] весьма близки к этой величине и укладываются в интервале 60—80 ГПа. Некоторое превышение этих величин над значением $\rho_0 = 56$ ГПа вполне естественно и связано с тем, что значительная доля энергии дислокации размещена в зоне слабых упругих деформаций, удаленной от сильно искаженного ядра дислокации и вклад этой части энергии искажает требуемое соотношение (8) энергии и приращенного объема. Но степень этого искажения различна для ситуаций типа больших хаотических скоплений дислокаций, однородно распределенных слабо взаимодействующих дислокаций и вакансионных ансамблей, что создает физическую основу для распознавания типа процесса, происходящего при отжиге наклепанного металла — вакансионного отдыха, полигонизации или рекристаллизации — по мере отклонения величины соотношения $qD/\delta V$ от константы, присущей данному металлу [15].

Так или иначе, в результате анализа закономерностей объемно-энергетических изменений в ТТ установлено, что в процессах теплового расширения, а также в результате больших (нелинейных) упругих деформаций решетки, имеет место пропорциональное соотношение между приростом потенциальной энергии атомно-молекулярных связей и соответствующим приростом объема тела. Примечательная особенность этого явления состоит в том, что избыточная энергия «располагается» в избыточном объеме тела с той же плотностью, что и энергия межатомной связи в исходном объеме V_0 — с плотностью энергии $\rho_0 = Q_0/V_0$. Это явление мы назвали принципом сохранения плотности потенциальной энергии (ПСППЭ) в процессах теплового расширения и упругих деформаций [10]. Впрочем, правильнее его было бы назвать принципом пропорциональности объемно-энергетических изменений.

Необходимо отметить, что в области механических явлений этот принцип справедлив лишь ограниченно, в частности он, по видимому, не выполняется в условиях деформации всестороннего сжатия, когда прирост объема тела уменьшается, а энергия возрастает, плотность энергии при этом увеличивается, а не остается постоянной. Второй случай уже рассматривался выше — в условиях

растяжения в рамках закона Гука. В области тепловых процессов подобных ограничений, по-видимому, не существует — постоянство отношений $\Delta U_r/\Delta V$ сохраняется даже при температурах ниже Дебаевских, когда Дебаевское понижение теплоемкости сопровождается пропорциональным снижением коэффициента термического расширения.

Таким образом, в области тепловых процессов ПСППЭ действует гораздо шире, чем в области механических явлений, и тем не менее из него вытекает много интересных для физики твердого тела следствий, часть из которых повторяет уже известные закономерности, другие представляют собой новую методологическую базу для решения ряда интересных и полезных задач, вплоть до новых энергетических критериев разрушения твердых тел.

1.2. Некоторые следствия из принципа сохранения плотности энергии

Из выражений (2) и (3) вполне очевидным является результат:

$$\frac{3R\Delta T}{2\alpha_v V_0 \Delta T} = \rho_0$$

Если учесть, что $3R = C_p$ (C_p — теплоемкость ТТ при постоянном давлении), то получаем:

$$\frac{C_p}{\alpha_v} = 2Q_c \quad (9)$$

Но согласно закону Грюнайзена это же соотношение имеет вид:

$$\frac{C_p}{\alpha_v} = \frac{KV_0}{\chi} \quad (10)$$

где K — модуль всестороннего сжатия, χ — постоянная Грюнайзена, являющаяся мерой ангармонизма потенциала межатомного взаимодействия [17]. Как видим формула (9) представляет собой выражение для закона Грюнайзена (10), а закон Грюнайзена (10), в свою очередь, представляет форму проявления принципа сохранения плотности энергии в ТТ. Следовательно, закон Грюнайзена может служить еще одним вариантом доказательства справедливости принципа СППЭ.

Но поскольку выражение (9) и (10) получены независимо друг от друга, то их объединение даст новый результат, а именно из формул (9) и (10) следует:

ТАБЛИЦА 2. Сравнение расчетных и экспериментальных значений модуля всестороннего сжатия K и коэффициента Грюнайзена χ для некоторых металлов.

Металл (веще- ство)	ρ_0 , ГПа		χ (эксп.) по [17]	K , ГПа			χ расч. (эксп.)
	Q_c эксп. по [11]	Q_c расч. по (47)		ρ_0 взято по п.2	ρ_0 взято по п.3	эксп. [20]	
1	2	3	4	5	6	7	8
Al	23	21	2,1...2,3	101	92	75	1,8 (2,2)
Fe	56,7	55,7	1,4...1,6	170	167	172	1,54 (1,5)
Ni	53	58	1,8...1,9	196	214	205	1,76 (1,85)
Ti	39	41	1,3	101	107	126	1,54 (1,3)
Au	38	34	3,06	232	208	175	2,6 (3,06)
Cr	50	59	2,0	200	236	194	1,94 (2,0)
V	39	61	1,36	109	171	165	1,4 (1,36)
W	90	85	1,7	306	289	320	1,9 (1,7)
Zn	14	16,7	2,0	56	67	62	1,9 (2,0)
Cd	9	10	2,3	41	46	48	2,4 (2,3)
K	1,8	1,79	1,3...2,5	4,7	4,6	4,1	1,15 (~ 1,7)
Na	4,8	3,5	1,2...1,5	13	9,5	8,3	1,2 (1,35)
H ₂ O	2,4	—	—	2,4	—	2,0	0,42 (—)

$$\frac{KV_0}{\chi} = 2Q_c \quad (11)$$

Формула (11) представляет собой новую связь между термодинамическими и упругими характеристиками ТТ, откуда, в частности, вытекает возможность осуществить расчет фундаментальной упругой константы ТТ — модуля всестороннего сжатия K через параметры Q_c и V_0 , а значит, через ρ_0 :

$$K = 2\chi \frac{Q_c}{V_0} = 2\chi\rho_0 \quad (12)$$

Достоверность значений K , вычисляемых по (12) (табл. 2) в значительной мере зависит от точности величины коэффициента Грюнайзена χ , разброс значений которого по данным разных источников столь значителен [17], что на самом деле формулу (12) разумнее использовать для вычисления χ , исходя из достоверно известных экспериментальных значений K и расчетных величин ρ_0 (табл. 2).

Опираясь на термодинамическое обоснование модуля всесторон-

ТАБЛИЦА 3. Сравнение расчетных и экспериментальных значений модуля Юнга E и множителя T_v в формуле (14)

Металл	ρ_0 , ГПа	$\frac{K}{\rho_0} = 2\chi$	ν	$1 - 2\nu$	χ расч.	$T_v = 2\chi(1-2\nu)$	E , ГПа		E (эксп.)
							$E \approx 3\rho_0$	E , расч. по (14)	
1	2	3	4	5	6	7	10	11	12
Al	23	3,26	0,34	0,32	1,63	2,2	69	97	72
Fe	57	3,0	0,29	0,42	1,5	1,5	171	215	217
Ni	53	3,5	0,31	0,38	1,76	1,85	159	224	205
Ti	39	3,23	0,34	0,32	1,6	1,3	117	97	108
Au	38	4,6	0,42	0,16	2,3	3,06	114	112	80
Ag	28	3,7	0,38	0,24	1,85	2,35	84	95	83
Cr	50	3,9	0,29	0,42	1,95	2,0	150	252	240
W	90	3,6	0,29	0,42	1,8	1,7	270	386	390
Zn	14	4,4	0,29	0,42	2,2	2,0	42	71	90
Cd	9	4,6	0,30	0,40	2,3	1,84	27	50	53
Mg	10	3,3	0,28	0,44	1,65	2,0	30	53	43
Na	4,8	1,73	0,32	0,36	0,86	1,35	14,4	14	9,1
K	1,8	2,3	0,35	0,3	1,15	1,8	6,4	6,4	3,6

него сжатия K по (12), можно представить и другие упругие постоянные ТТ — модуль Юнга E , модуль сдвига G и коэффициент Пуассона ν .

Так, в теории упругости между константами K и E имеется связь:

$$K = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \quad (13)$$

Из сравнения (12) и (13) следует:

$$E = 2\chi(1 - 2\nu) \cdot 3 \frac{Q_c}{V_0} = T_v \cdot 3\rho_0 \quad (14)$$

Основной вклад в величину модуля Юнга вносит множитель $3\rho_0$ или плотность энергии межатомных связей, другой множитель $T_v = 2\chi(1 - 2\nu)$, в который входят интересующие нас постоянные χ и ν , имеет величину порядка 1 (табл. 3).

Если пренебречь отклонением T_v от 1, то расчет модуля E по формуле

$$E \approx 3\rho_0 \quad (15)$$

дает вполне разумную оценку для большинства металлов (за исключением W, Zn и Cd) (табл. 3). Во всех остальных случаях поправкой на множитель можно пренебречь и считать $T_v \approx 1$, т. е.:

$$2\chi(1 - 2\nu) \approx 1$$

и

$$\chi \approx \frac{1}{2(1 - 2\nu)} \quad (16)$$

Это означает прямую связь между такими разными по своей физической природе константами — термодинамической χ и механической ν . Формула (16) пригодна для быстрой оценки постоянной Грюнайзена с точностью не хуже экспериментальной [17]. Однако, главная полезность формулы (16) состоит в том, что она способствует установлению внутренней связи двух коэффициентов χ и ν . Как видим, увеличению коэффициента Пуассона ν соответствует увеличение коэффициента Грюнайзена χ , т. е. возрастает мера ангармонизма в межатомном взаимодействии. Увеличение ν в физическом плане означает усиление реакции поперечного сжатия ТТ при его продольном растяжении, т. е. способствует сохранению объема деформируемого тела. Это следует воспринимать как проявление «мягкости» межатомных связей, их более легкой переориентации в условиях изменяемой под действием растяжения атомной конфигурации решетки. Здесь с очевидностью проявляется физическая природа связи коэффициента Пуассона с понятием «жесткости» атома или межатомных связей. Как видим, установление связи упругих характеристик ТТ с плотностью энергии ρ_0 позволяет не только получить простые формулы для их количественных оценок но и в ряде случаев более четко выявить их физическую природу.

1.3. Поверхностная энергия твердых тел

Понятие поверхностной энергии в физике твердого тела возникает, когда требуется рассмотреть энергетическое состояние атомного слоя вещества, выходящего на свободную поверхность тела. Некоторая часть атомных связей у атомов на поверхности тела является свободной, и эта часть энергии представляет собой свободную энергию поверхности, а ее поверхностная плотность рассматривается как поверхностная энергия γ , играющая важную роль во многих физико-химических процессах, в частности в разрушении твердых тел. Впервые этим воспользовался, как известно, А. Гриффитс, положив γ как меру энергетических затрат при разрушении [1]. Не вдаваясь здесь в глубокую физическую суть этого параметра ТТ, коснемся

этого вопроса лишь потому, что параметр γ имеет общую физическую базу с константой ρ_0 . Действительно, если есть такая физическая константа материала как объемная плотность энергии связи ρ_0 , то нетрудно представить себе, что должна быть и другая постоянная — поверхностная плотность этой же энергии, если всю энергию U_{am} в объеме V_{am} , занимаемом атомом в пространстве — $U_{am} = \rho_0 V_{am}$ — разместить на поверхности S_{am} , ограничивающей этот элементарный атомный объем. Такая модель γ удобна тем, исключает необходимость детального учета распределения атомных связей по конкретным соседям в 1-й, 2-й и др. координационных сферах, ибо действие этих связей представлено в фундаментальной константе $\rho_0 = Q_c/V_0$. Важно лишь, чтобы этот представительный элементарный объем атома V_{am} полностью, без каких-либо пустот заполнял пространство материала в контакте со своими соседями, поэтому ясно, что сделать это можно только в модели кубической формы «эффективного» атома. Это, конечно, не означает, что мы пытаемся ввести представление об атомах в ТТ, как о неких «кубиках» вместо привычных сфер, но в качестве физической модели для вычисления γ этот подход, как мы увидим далее, вполне оправдан.

Энергия связи, приходящаяся на 1 атом U_{am} :

$$U_{am} = \frac{Q_c}{N} \quad (17)$$

($N = 6 \cdot 10^{23}$ ат./моль — число Авогадро), и согласно нашей модели эта энергия равна $U_{am} = \rho_0 V_{am}$, где $V_{am} = b_{эф}^3$, $b_{эф}$ — эффективный размер ребра модельного элементарного объема атома. Эффективный размер атомной ячейки — $b_{эф} = V_{am}^{1/3}$, где V_{am} :

$$V_{am} = \frac{V_0}{N} \quad (18)$$

(V_0 — объем грамм-моля вещества, $N = 6 \cdot 10^{23}$ ат./моль).

Поверхностная энергия γ по своему численному значению — это энергия связи в объеме атома $V_{am}\rho_0$, размещенная на поверхности элементарного кубика $S_{am} = 6b_{эф}^2$:

$$\gamma_p = \frac{U_{am}}{S_{am}} = \frac{Q_c}{NS_{am}} = \frac{Q_c}{6Nb_{эф}^2} = \frac{Q_c b_{эф}}{6NV_{am}} = \frac{Q_c}{6V_0} b_{эф} = \frac{1}{6} \rho_0 b_{эф}. \quad (19)$$

Здесь в произведении $\rho_0 b_{эф}$ объемная плотность энергии связи ρ_0 спроецирована на поверхность элементарного объема атома и трансформирована в поверхностную плотность γ , причем надо отметить, что не в полном количественном представлении ρ_0 , а лишь в 1/6 части ρ_0 . Следовательно, свободную поверхностную энергию атома представляет лишь 1/6 часть его энергии связи, а не ее поло-

вина, как иногда принято считать в литературе [18].

В соответствии с данной моделью γ_p по (19), разумеется, еще не представляет собой искомую величину поверхностной энергии материала, т. к. требуется учесть реальную плотность упаковки атомов в плоскостях кристаллических структур разного типа. По своему физическому содержанию γ_p по (19) есть максимально возможная поверхностная плотность энергии для атомов (молекул) данного вещества, потому что реальная энергия связи атомов Q_d/N здесь отнесена к наименьшей возможной поверхности ($S_{am} = 6b_{эф}^2$) элементарного кубического объема, принадлежащего одному атому. По сути, это означает, что атомы в кристалле образуют простейший тип структурной упаковки — простую кубическую решетку. На самом деле большинство металлов образуют более плотноупакованные решетки — ОЦК, ГЦК или ГПУ. В такой элементарной ячейке 2 или 4 атома своей суммарной энергией связи создают ту же объемную плотность энергии ρ_0 , но параметр решетки в этом случае увеличен соответственно пропорциональному увеличению объема элементарной ячейки. Эти n атомов в ячейке кристалла образуют поверхность, которая больше поверхности атома, но меньше, чем суммарная поверхность n атомов в отдельности. В этом проявляется энергетическая выгодность образования плотноупакованной структуры в сравнении с примитивной кубической. Если рассчитать γ для энергии n атомов в элементарной ячейке, то она окажется завышенной ($\gamma > \gamma_p$), т. к. из такого расчета частично исключены внутренние поверхности элементарных объемов n атомов, находящихся в одной ячейке. Это обстоятельство наглядно демонстрирует преимущество принятой модели в виде «эффективных» кубических объемов одиночных атомов, когда величина γ_p представляется в наиболее простом и ясном способе ее исчисления, при котором энергия одного атома относится к поверхности объема, принадлежащего этому же атому. И хотя численное значение γ_p превышает физически реальную величину поверхностной энергии в определенных кристаллических плоскостях решетки γ_{hkl} последнюю легко вычислить, если правильным образом учесть долю площадей, которую представляют модельные «квадратики» атомов $b_{эф}^2$ в реальных площадях S_{hkl} в элементарных ячейках кристаллической решетки. Иными словами γ_p представляет собой своеобразный энергетический концентрат, который следует немного «разбавить», распределив его на площадке (hkl) с учетом числа атомов n' , приходящихся на эту площадку в пределах элементарной ячейки.

Таким образом, величина η :

$$\eta = \frac{b_{эф}^2}{S_{hkl}} n' \quad (20)$$

является коэффициентом понижения реальной физической величины

поверхностной энергии кристалла по плоскости (hkl) в сравнении с исходной расчетной величиной «концентрации» γ_p в (19):

$$\gamma_{hkl} = \gamma_p \cdot \frac{b_{эф}^2}{S_{hkl}} n', \quad (21)$$

где n' — количество атомов, располагающихся на площадке с индексами (hkl) в одной элементарной ячейке кристалла.

Например, на площадке (100) ОЦК решетки α -Fe имеем: $n' = 1$; $S_{100} = b^2$ (b — параметр решетки α -железа, $b = 2,86 \cdot 10^{-10}$ м); $b_{эф} = 2,28 \cdot 10^{-10}$ м, $\eta_{(100)} = 0,65$; $\gamma_p = 2,2$ Дж·м⁻²; $\gamma_{(110)} = 1,41$ Дж·м⁻².

На площадке с индексами (110), являющейся наиболее плотноупакованной плоскостью в ОЦК решетке (плоскость скольжения), имеем: $n' = 2$; $S_{(110)} = b^2 \sqrt{2} = 11,6 \cdot 10^{-20}$ м²; $\eta_{(110)} = 0,9$; $\gamma_{(110)} = 1,98$ Дж·м⁻².

На площадке (111): $n' = 0,5$; $S_{(111)} = 7,1 \cdot 10^{-20}$ м²; $\eta_{(111)} = 0,37$; $\gamma_{(111)} = 0,8$ Дж·м⁻². Как видим, наименьшей поверхностной энергией в ОЦК решетке обладает плоскость (111), а не (100).

Для ГЦК решетки железа (аустенита): $\gamma_{(100)} = 1,8$ Дж·м⁻²; $\gamma_{(110)} = 1,28$ Дж·м⁻²; $\gamma_{(111)} = 2,1$ Дж·м⁻².

Как видим, плоскости решетки аустенита обладают более высокой поверхностной энергией, чем плоскости феррита, что, естественно, связано с большим числом атомов в кристаллической ячейке — γ -фазы, несмотря на то, что параметр решетки аустенита также больше ($b_\gamma = 3,56 \cdot 10^{-10}$ м; $b_\alpha = 2,86 \cdot 10^{-10}$ м).

Поверхностная энергия, экспериментально определяемая на поликристаллических сплавах, конечно, оказывается статистически усредненной по ансамблю плоскостей, выходящих на поверхность. Для α -Fe эта величина составит примерно $\gamma \approx 1,4$ Дж·м⁻², а среднестатистическое значение параметра $\eta \approx 0,63$.

Для жидких расплавов металлов величина $\gamma_{ж}$ должна быть примерно такой же (т. е. $\gamma_{ж} \approx \gamma$), поскольку энергия связи атомов в расплаве ($Q_{усл}$) лишь несколько процентов меньше, чем в твердой фазе (Q_c). Поэтому для оценки величины γ для жидких расплавов с приемлемой точностью можно пользоваться приближенной формулой

$$\gamma_{ж} = \gamma_p \cdot \bar{\eta} \approx 0,6\gamma_p \quad (22)$$

в чем можно убедиться, сравнив расчетные и опытные значения $\gamma_{ж}$ для некоторых металлов (табл. 4). Более того, как оказалось, примененная выше модель единичной атомной ячейки в виде «кубика» обнаруживает свою пригодность для расчетов поверхностной энергии не только одноатомных металлов, но также воды и сложных органических веществ, структура молекул которых весьма далека от кристаллических ячеек металлов. Можно заключить, что предложенный здесь принцип расчета γ в модели «кубика» форма реальной молекулы имеет второстепенное значение. В этом отношении опора

ТАБЛИЦА 4. Оценка поверхностной энергии некоторых металлов и веществ

Металл (вещество)	Поверхностная энергия, Дж/м ²				
	Расчет			Экспериментальные данные [11]	
	γ_p (19)	$\bar{\gamma}_{hkl}$ (21)	$\gamma_{ж}$ (22)	жидкое состояние	твердое состояние
Ag	1,2	0,92	—	0,8...0,9	1,2
Ni	1,48	0,94	—	1,6...1,7	1,7
Cu	1,65	1,27	—	1,0...1,1	1,4...1,8
Al	1,0	0,77	—	0,5...0,9	
Fe	2,2	1,48	—	1,36...1,54	1,7...2,1
Ti	1,73	—	—	1,5	
Au	1,6	1,24	—	1,0...1,13	1,3...1,7
Mo	3,38	2,5	—	—	—
W	3,8	2,8	—	—	3,0
Pb	0,58	—	—	0,4	—
Zn	0,6	—	—	0,75...0,8	0,75...0,8
H ₂ O	0,11	—	0,067	0,073	—
CH ₃ OH	0,058	—	0,034	0,023	—
C ₂ H ₅ OH	0,042	—	0,025	0,024	—
CH ₃ COCH ₃	0,031	—	0,019	0,024	—

на главную фундаментальную константу вещества — плотность энергии связи ρ_0 оказалось полезной для объяснения природы другой важной физической величины — поверхностной энергии твердых и жидких тел, т. е. конденсированных систем вообще.

1.4. Теоретическая прочность на отрыв

Теоретической прочностью на отрыв $\sigma_{теор}$ называют такое напряжение растяжения, при котором происходит разделение двух частей твердого тела путем одновременного разрыва всех атомных связей в плоскости отрыва. Понятно, что для реальных металлов это идеализированная схема, ибо для того, чтобы она реализовалась, необходимо «запретить» в кристалле процессы зарождения, размножения и передвижения дислокаций, которые происходят при напряжениях на несколько порядков меньше, чем предельная прочность межатомных связей. Это возможно лишь в двух особых случаях: 1) в кристаллах с идеальной решеткой (так называемых «усах»), 2) в обычных реальных металлах в чрезвычайно локализованной области кристалла на кончике идеально острой нанотрещины, где создается пиковое напряжение порядка $\sigma_{теор}$, но отсутствуют действую-

щие источники дислокаций. В стеклах или в керамических материалах, где дислокаций либо вообще нет или их подвижность крайне ограничена, теоретическая прочность была бы достижима, если бы в объеме материала не было субмикроскопических трещин (нанотрещин), имеющих идеально острую вершину, радиусом «закругления» порядка межатомного расстояния b . Присутствием таких нанотрещин в стеклах различие на 2 порядка между прочностью межмолекулярных связей и прочностью испытываемых образцов из стекла впервые объяснил А. Гриффитс [1]. С тех пор причиной резкого различия между теоретической и реальной прочностью твердых тел в физике неизменно считают присутствие готовых (в хрупких материалах) или зарождение в ходе пластической деформации (в металлических сплавах) гриффитсовских нанотрещин.

Итак, теоретическая прочность — это, в сущности, прочность межатомных связей, которая по своей величине, конечно, является предельно большой, т. е. может называться предельной прочностью материала данного типа $\sigma_{лр}$.

Строгой физической модели для вычисления $\sigma_{теор}$ в литературе не существует, но для грубых оценок традиционно используют известную формулу Орована

$$\sigma_{теор} = \left(\frac{\gamma E}{b} \right)^{1/2}, \quad (23)$$

полученную на основе предположения о синусоидальном законе изменения σ при упругой деформации до разрушения [19]. Заменяв γ в (23) его значением, выраженным через ρ_0 по (19), а ρ_0 через E по (15) получим известную в литературе оценочную формулу [20]:

$$\sigma_{теор} \approx E/5 \quad (24)$$

Слабым местом такой оценки $\sigma_{теор}$ по (24) является отсутствие физического смысла в формуле (24), т. к. из нее следует, что величина предельной упругой деформации $\varepsilon_{лр}$ в момент разрыва равна $\approx 1/5$, что неверно, т. к. закон Гука при этом не выполняется и реальная упругая деформация при разрыве атомных связей заведомо больше, но тогда модуль E имеет не табличное, а более низкое значение текущего модуля E . В правильном вычислении предельных значений величин $\varepsilon_{лр}$ и E кроется вся сложность решения задачи определения $\sigma_{лр}$, т. к. истинный закон изменения силы растяжения от степени деформации при больших растяжениях межатомных связей вовсе не синусоидальной, чтобы обойти эту классическую трудность в решении задачи $\sigma_{теор}$ мы воспользуемся принципом постоянства плотности энергии, справедливым для больших, нелинейных упругих деформаций.

При сильном растяжении кристалла (не содержащем источников дислокаций) растет запас упругой энергии ΔU_n снижается текущий модуль Юнга, растет объем элементарной ячейки (ΔV_n), но отношение $\Delta U_n/\Delta V = p_0$ остается постоянным (8), равным $p_0 = Q_d/V_0$.

Прирост упругой энергии ΔU_n есть плотность упругой энергии $\Delta W = \sigma^2/(2E)$, умноженная на объем грамм-атома V_0 :

$$\Delta U_n = \frac{\sigma^2}{2E} V_0 K_v \quad (25)$$

где K_v — коэффициент увеличения объема при напряжении σ : $K_v = 1 + \delta V$, δV — относительный прирост объема; $\delta V = (1 - 2\nu)\varepsilon$, ε — относительная деформация.

Из закона сохранения энергии следует, что прирост потенциальной энергии ΔU_n^{np} в предельном состоянии решетки должен равняться энергии связи всех атомов в объеме V_0 , т. е. Q_c :

$$\frac{\sigma_{np}^2}{2E} V_0 K_v^{np} = Q_c \quad (26)$$

Из принципа сохранения плотности энергии в избыточном объеме ΔV следует $\Delta U_n/\Delta V = p_0$:

$$\frac{\sigma_{np}^2 V_0 K_v^{np}}{2E \Delta V^{np}} = \frac{Q_c}{V_0} \quad (27)$$

Из сопоставления (26) и (27) следует, что прирост объема в предельном состоянии ΔV^{np} , равен исходному объему V_0 : $\Delta V^{np} = V_0$, т. е. $\delta V = 1$, а K_v^{np} :

$$K_v^{np} = 1 + \frac{\Delta V^{np}}{V_0} = 2 \quad (28)$$

Относительные изменения длины ε и объема δV связаны между собой:

$$\delta V = (1 - 2\nu)\varepsilon \quad (29)$$

где ν — коэффициент Пуассона. Для железа — $\nu \approx 0,3$, и если $\delta V = 1$, имеем:

$$\varepsilon_{np} = \frac{1}{1 - 2\nu} \approx 2,5 \quad (30)$$

Как видим, в предельном состоянии решетки при растяжении двукратному увеличению объема ($K_v = 2$) соответствует коэффициент линейной вытяжки $\mu = 1 + \varepsilon \approx 3,5$, т. е. исходный параметр решетки b увеличен в 3,5 раза. Вполне очевидна некорректность применения

формул (29) и (30) для больших нелинейных деформаций, ибо в общем случае справедлива более сложная зависимость δV от ε :

$$K_v = 1 + \delta V = (1 + \varepsilon)(1 - \nu\varepsilon)^2 \quad (31)$$

Здесь представлен вклад в увеличение объема δV слагаемых, содержащих члены с ε^2 и ε^3 , которыми при больших $\varepsilon \geq 1$ пренебрегать нельзя.

Но уравнение (31) для предельного состояния ($K_v = 2$) имеет то же решение $\varepsilon_{np} \approx 2,5$ при условии, что коэффициент Пуассона в предельном состоянии $\nu_{np} \approx 0,098 \approx 0,1$. Этот на первый взгляд, странный результат на самом деле физически вполне обоснован, т. к. при больших упругих деформациях атомные связи настолько перенапрягаются, что кристаллическая решетка становится более жесткой, менее податливой в поперечном направлении, в силу чего поперечная деформация при одноосном растяжении становится относительно меньшей, а это означает уменьшение коэффициента Пуассона ν . Мысль о том, что при предельном напряжении кристалла до разрыва атомных связей коэффициент Пуассона уменьшается до нуля и даже меняет свой знак на отрицательный (!) высказывается Макмилланом в работе [19], посвященной расчетам теоретической прочности твердых тел.

Таким образом, в предельном состоянии вследствие принципа сохранения плотности энергии $\delta V_{кр} = 1$ и $\varepsilon_{np} \approx 2,5$, т. е. формально можно использовать выражение (30) для вычисления ε_{np} с табличным значением коэффициента Пуассона $\nu = 0,3$.

Теперь можно записать предельную прочность σ_{np} в виде квазигуковского выражения:

$$\sigma_{np} = \varepsilon_{np} \bar{E} \quad (32)$$

где \bar{E} — так называемый «секущий модуль, т. е. условный модуль, уменьшенный в сравнении с E настолько, что в сочетании с физически реальной величиной деформации $\varepsilon_{np} \approx 2,5$ дает действительное значение σ_{np} . Остается найти \bar{E} в его соотношении с E . Для этого подставим σ_{np} из (32) в (26):

$$\frac{\varepsilon_{np}^2 \bar{E}^2}{2\bar{E}} V_0 K_v^{np} = Q_c,$$

откуда, с учетом $K_v^{np} = 2$:

$$\bar{E} = \frac{1}{\varepsilon_{np}^2} \cdot \frac{Q_c}{V_0} = (1 - 2\nu)^2 \rho_0 \quad (33)$$

Следовательно, из (32):

$$\sigma_{np} = (1 - 2\nu)\rho_0 \quad (34)$$

Оценку величины E получим, если в (33) подставим ρ_0 из (15):

$$\bar{E} \cong (1 - 2\nu)^2 \cdot \frac{E}{3} \approx \frac{E}{20} \quad (35)$$

Как видим, условный, «секущий» модуль в предельном состоянии \bar{E} намного меньше модуля Юнга и пренебрегать этим различием в данной задаче недопустимо.

Для сравнения с формулой Орована (24) подставим (35) в (32):

$$\sigma_{np} \approx 2,5 \cdot \frac{E}{20} = 0,125E = \frac{E}{8} \quad (36)$$

что численно близко к расчету по Оровану, но не надо забывать, что коэффициенты $1/5$ и $1/8$ в (32) и (36) не имеют физического смысла предельной деформации решетки, а служат лишь расчетными параметрами для оценки σ_{np} и $\sigma_{теор}$ при использовании табличного значения модуля Юнга E . Для железа, в частности, $\rho_0 = 56$ ГПа, $\nu \approx 0,3$ и по (34): $\sigma_{np} = 0,4\rho_0 = 22,4$ ГПа, тогда как по Оровану ($E = 220$ ГПа) $\sigma_{теор} \approx 44$ ГПа, что следует считать существенно завышенной величиной.

Как видим, предельная (теоретическая) прочность на отрыв σ_{np} непосредственно связана с константой ρ_0 — плотностью потенциальной энергии связи атомов решетки и «жесткостью» атома $\omega = 1 - 2\nu$. В случае равномерного трехосного растяжения предельное состояние легко получить из простых соображений — объем увеличивается в 2 раза, следовательно плотность энергии составит $0,5\rho_0$, линейная деформация при разрыве — $\varepsilon_{np}^{об} = 0,33$, т. е. $\sigma_{np}^{об} = 0,5\rho_0 = 28$ ГПа и совсем не зависит от «жесткости» атома.

Можно легко получить предельную прочность кристалла по любой плоскости (hkl) . Для этого надо поставить \bar{E}_{hkl} в (26) и учесть, что $K_v^{np} = 2$:

$$\sigma_{np(hkl)} = (\bar{E}_{hkl} \cdot \rho_0)^{1/2} = (\bar{E} \cdot \bar{E}_{hkl} / \bar{E}\rho_0)^{1/2} = (1 - 2\nu)\rho_0(\bar{E}_{hkl} / \bar{E})^{1/2}$$

Если считать, что $\bar{E}_{hkl} / \bar{E} \approx E_{hkl} / E$, то различие $\sigma_{np(hkl)}$ от σ_{np} сводится к множителю типа $(E_{hkl} / E)^{1/2}$:

$$\sigma_{np(hkl)} \approx \sigma_{np} \left(\frac{E_{hkl}}{E} \right)^{1/2} \quad (37)$$

Например, для α -Fe: $E = 2,2 \cdot 10^{11}$ Па; $E_{100} = 1,3 \cdot 10^{11}$ Па [20]:

$$\sigma_{np(100)} \approx 22,4 \cdot (1,3 / 2,2)^{1/2} \text{ ГПа} \approx 17,2 \text{ ГПа} \quad (38)$$

ТАБЛИЦА 5. Расчет предельной (теоретической) прочности $\sigma_{пр}$ некоторых металлов и веществ

Металл (вещество)	$\rho_0 = \frac{Q_c}{V_0}$	Жесткость атома $\omega = 1 - 2\nu$	$\sigma_{пр}$, ГПа по (34)
Al	23	0,31	7,1
Fe	56	0,42	24
Ni	53	0,38	20
Cu	47	0,32	15
Ti	39	0,32	12,5
Au	38	0,16	6,1
Ag	28	0,24	6,7
Cr	50	0,42	21
W	90	0,42	38
V	39	0,28	10,5
Zn	14	0,40	5,6
Cd	9	0,40	3,6
Na	4,8	0,30	1,8
K	1,8	0,30	0,54
H ₂ O	2,4	1	2,4
CH ₃ OH	1,15	1	1,15

Такова минимальная предельная прочность кристалла α -железа по наименее упакованной плоскости (100), которую обычно рассматривают в α -Fe, как плоскость легчайшего скола.

В табл. 5 приведены расчетные значения $\sigma_{пр}$ по (26) для некоторых металлов.

1.5. Теоретическая прочность на сдвиг

Под теоретической прочностью при сдвиге идеального кристалла понимают такое напряжение сдвига $\tau_{теор}$, при котором оказывается возможным одновременное перемещение всех атомов одной плоскости кристалла относительно соседней хотя бы на одно межатомное расстояние b . При этом не происходит разрыва атомных связей, а возникает лишь определенное перенапряжение их, связанное с переориентацией атомных связей, вызванной смещением атома в плоскости сдвига на расстояние порядка b . В связи с периодичностью поля сил межатомного взаимодействия в решетке для преодоления теоретической прочности на сдвиг достаточно элементарного сдвига всей плоскости на одно межатомное расстояние в направлении наиболее плотной упаковки атомов. В этом заключается принци-

пиальное отличие деформации сдвигом идеальной решетки от ее разрыва, где предельная деформация связана с полным разрывом атомных связей. Поэтому неверным является представление о том, что энергетическое состояние идеального кристалла при разрыве эквивалентно состоянию плавления металла [21], на самом деле в жидком состоянии силы связей не исчезают, а возникает лишь неустойчивость решетки, при которой исчезает сопротивление решетки действию напряжений сдвига, из-за чего жидкость свободно растекается по горизонтальной поверхности. Поэтому энергетическим эквивалентом механического состояния при напряжении τ_{meop} может являться состояние плавления металла.

Таким образом можно сформулировать исходную посылку модели теоретической прочности на сдвиг идеального кристалла — упругая энергия решетки при τ_{meop} равна потенциальной энергии решетки при температуре плавления T_s : $\Delta U_s = (3/2)RT_s$, и потому

$$\frac{\tau_{meop}^2}{2G} V_0 K_v = \frac{3}{2} RT_s \quad (39)$$

Здесь G — модуль сдвига в критическом состоянии решетки в момент достижения τ_{meop} . Из принципа сохранения плотности потенциальной энергии отношение $\Delta U_s / \Delta V_s$ должно равняться p_0 :

$$\frac{\tau_{meop}^2}{2G} \frac{V_0 K_v}{\Delta V_s} = p_0 \quad (40)$$

Из (39) и (40) следует:

$$Q_c \cdot \frac{\Delta V_s}{V_0} = \frac{3}{2} RT_s \quad (41)$$

Поскольку между энергией сублимации Q_c и температурой плавления металла T_s существует пропорциональная зависимость, установленная экспериментальным путем [22]:

$$Q_c \approx 220 T_s \text{ Дж/г-моль}, \quad (42)$$

то, подставив (42) в (41), получим:

$$\delta V_s = \frac{\Delta V_s}{V_0} = \frac{3R}{2 \cdot 220} \approx 6 \cdot 10^{-2} \quad (43)$$

Мы приходим к известному правилу Линдемана, согласно которому относительное увеличение объема всех металлов при нагреве до температуры плавления постоянно и примерно равно 6% [14, 17]. Коэффициент увеличения объема при температуре плавления T_s

равен $K_v = 1 + \delta V_s = 1,06$.

Деформация сдвига есть $\gamma = \tau/G$ (G — начальный модуль сдвига), предельная деформация $\gamma_{пр}$ не может быть больше 1, поэтому $\gamma_{пр} = G$, где G — модуль сдвига в критическом состоянии решетки. С учетом этого из (39) получим:

$$\tau_{теор} \approx \frac{3RT_s}{V_0 K_v} \quad (44)$$

Для железа, например, оценка $\tau_{теор}$ по (44) дает величину 6 ГПа, что приближенно составляет десятую часть от G :

$$\tau_{теор} \approx 0,1G \quad (45)$$

Это довольно близко к известному результату Маккензи [23]: $\tau_{теор} \approx 0,12G$. Критерием проверки $\tau_{теор}$ по (44) и предположения (45) может служить вычисление модуля G , полученное из сравнения (44) и (45), поскольку в отличие от величин $\tau_{теор}$ экспериментальные значения G хорошо известны:

$$G \approx \frac{30RT_s}{V_0 \cdot 1,06} \quad (46)$$

Из табл. 6 видно, что за исключением металлов с гексагональной решеткой (Zn, Cd) согласие расчета G с экспериментом не хуже, чем по величинам K и E (табл. 2 и 3).

Таким образом, в целом, можно считать удовлетворительной модель, представляющую напряжение сдвига для идеального кристалла как энергетический эквивалент состояния расплавления. К сожалению, такая модель не годится для интерпретации $\tau_{теор}$ для аморфных материалов, не имеющих точно фиксированной температуры плавления T_s .

Более показательным, а главное, практически полезным, может оказаться другой способ проверки принятой модели расчета $\tau_{теор}$, основанном на возможности теоретического расчета такой важной фундаментальной характеристики металлов как энергия сублимации Q_c , экспериментальное определение которой, особенно для тугоплавких металлов, может быть довольно сложным. Используя полученные выше формулы (15) и (46) для E и G и известную связь между ними ($E = 2G(1 + \nu)$), получаем:

$$3 \frac{Q_c}{V_0} \approx 2 \cdot 30 \frac{RT_s}{V_0 \cdot 1,06} \cdot (1 + \nu),$$

откуда

ТАБЛИЦА 6. Расчет модуля сдвига G и теоретической прочности на сдвиг для некоторых металлов $\tau_{теор}$.

Металл	Температура плавления T_s, K	Объем грамм-атома $V_0 \cdot 10^6, m^3$	G, ГПа		$\tau_{теор},$ ГПа
			теория (46)	экспер.	
Al	933	10	23,5	26	2,3...2,5
Fe	1813	7,2	63,1	82	6,3...8,0
Au	1725	6,7	64,9	79	6,5...8,0
Cr	2270	7,3	78,4	90	7,8...9,0
Ti	2070	10,7	48,7	44	4,9...4,4
W	3660	9,4	98	51	9,8...5,1
Mo	2870	9,4	77	122	7,7...12
Zn	428	9,1	11,8	36	1,2...3,6
K	336	45	1,9	1,3	0,2...0,13
Na	373	22,6	4,2	3,5	0,4...0,35
H ₂ O (лед)	273	18	3,8	—	~0,4

$$Q_c \approx 20RT_s(1 + \nu) \quad (47)$$

Численно формула (47) дает близкую к эмпирической (42) зависимость Q_c от T_s , но точность формулы (47), по-видимому, выше, т. к. в ней больше отражена специфика каждого металла, поскольку содержит не один, а два параметра — T_s и ν . Во всяком случае расчетные по (47) и экспериментальные величины Q_c (табл. 1) вполне удовлетворительно согласуются между собой, поэтому для определения фундаментальной константы материала ρ_0 целесообразно пользоваться простой формулой:

$$\rho_0 = \frac{Q_c}{V_0} = \frac{20RT_s(1 + \nu)D}{A} \quad (48)$$

Формула (48) позволяет легко дать интерпретацию соотношению Зегера–Штелле (8):

$$\frac{q_p D}{\delta V_p} = \rho_0, \quad (49)$$

$$\frac{q_p D}{\delta V_p} = \frac{20RT_s(1 + \nu)}{V_0} = \frac{30RT_s}{V_0} \cdot \frac{20}{30}(1 + \nu) = G \frac{2}{3}(1 + \nu) \approx 0,8G$$

Напомним, что по Зегеру–Штелле [16] это соотношение численно должно равняться $\sim (0,5—0,9)G$ в зависимости от конкретного характера дислокационной структуры наклепанного металла (здесь q_p — тепловой эффект при рекристаллизации, δV_p — относительное уменьшение объема, G — модуль сдвига). Как видим, соотношение Зегера–Штелле (49), в целом, соответствует требованиям принципа сохранения плотности потенциальной энергии.

Итак, концепция плотности энергии, исходя из параметра плотности энергии связи ρ_0 , оказывается весьма плодотворной в моделях, дающих физическую интерпретацию основных упругих констант материалов K и E , а также поверхностной энергии γ и прочности межатомных связей в решетке предельной прочности $\sigma_{пр}$.

Есть все основания полагать, что понятие плотности энергии ρ_0 окажется не менее важным в формулировке критериев разрушения твердых тел, содержащих нано-, микро- и макротрещины. Тем самым создается возможность построения моделей разрушения твердых тел на основе новых, физически интерпретированных критериев предельного состояния.

2. РАЗРУШЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

В современной теории разрушения металлов имеется немало проблем. Главная из них состоит в том, что до настоящего времени не создано корректной физической модели процесса, поскольку привлекаемая к этой проблеме энергетическая модель Гриффитса [1], применима, строго говоря, лишь к разрушению идеально хрупких твердых тел, но и она, в свою очередь, обладает рядом изъянов даже применительно к хрупким материалам.

2.1. Энергетическая модель Гриффитса

Эта модель строится на концепции энергетического баланса, реализуемого в твердом теле, содержащем трещину в поле внешних растягивающих напряжений σ . В присутствии трещины длиной C потенциальная энергия тела уменьшается на величину ΔU в сравнении с тем же телом без трещины:

$$\Delta U = -\frac{\sigma^2}{4E} \pi C^2$$

Но в отличие от тела без трещины, тело с трещиной обладает дополнительной энергией поверхностного натяжения на двух свободных поверхностях трещины:

$$U_n = 2\gamma C$$

Поэтому общее изменение энергии тела с трещиной составит $\Delta W = \Delta U + U_n$:

$$\Delta W = -\frac{\sigma^2}{4E} \pi C^2 + 2\gamma C \quad (50)$$

Как видим, при увеличении длины трещины борются две противоположные тенденции — уменьшение запаса упругой энергии в теле ΔU и увеличение в виде поверхностной энергии $2\gamma C$, причем отрицательная составляющая растет в квадратичной зависимости от C , положительная — в линейной. В такой ситуации суммарная кривая энергии должна иметь максимум, отвечающий критической длине трещины $C_{кр}$, означающий, что при $C > C_{кр}$ при каждом шаге прироста длины трещины система уменьшает свою общую энергию и, следовательно процесс роста трещины длиной больше $C_{кр}$ будет идти самопроизвольно, лавинообразно до полного разрушения тела. Условие для $C = C_{кр}$ получаем, приравняв нулю производную от ΔW по C в (50):

$$\frac{d\Delta W}{dC} = -\frac{\sigma^2}{2E} \pi C + 2\gamma = 0, \quad (51)$$

откуда

$$\sigma_{зр} = \left(\frac{4\gamma E}{\pi C} \right)^{1/2}. \quad (52)$$

Заметим, что здесь везде C означает полную длину трещины, находящуюся внутри разрушаемого тела, а не половину $c = C/2$, как обычно принято в формулах механики:

$$\sigma_{зр} = \left(\frac{2\gamma E}{\pi c} \right)^{1/2}.$$

Экспериментальную проверку своей формулы А. Гриффитс осуществил в той же работе [1], измеряя напряжение разрыва стеклянных трубок и колб с нанесенными на них тонкими трещинами разной длины. В соответствии с формулой (52) произведение $\sigma_{зр} \sqrt{C} = \text{const}$ и в его экспериментах эта константа составляла в среднем величину $0,376 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$, теоретическое значение константы по (52) для стекла ($\gamma = 0,54 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$, $E = 63 \text{ ГПа}$) составило $0,206 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$, т. е. почти в 2 раза меньше. Это занижение теоретической величины в сравнении с экспериментом, на наш взгляд, имеет свое объяснение.

В действительности, энергетический баланс в виде формулы (50), где затраты энергии на образование свободной поверхности представлены как на $2\gamma C$, на самом деле включают лишь минимально необходимый уровень энергозатрат, но отнюдь не достаточный для

разрушения. Следовательно, критерий Гриффитса в виде формулы (52) имеет смысл необходимого, но недостаточного условия для разрушения.

Более полно и более точно учесть энергозатраты на образование поверхности можно, использовав представленную выше модель для определения поверхностной энергии γ по формуле (19):

$$\gamma = \frac{1}{6} \rho_0 b_{эф}.$$

Из вывода формулы (19) видно, что величина γ представляет собой одну шестую часть энергии связи атома $Q_{ам}$. Но для того, чтобы разрыв атомной связи оказался возможным общий запас упругой энергии в расчете на 1 атом должен составить $Q_{ам}$ (см. ф. (26)), т. е. в 6 раз больше той энергии, которая воплощается на поверхности трещины после разрыва связей. Это означает, что для образования свободной поверхности с энергией $2\gamma C$ требуется затратить энергии в 6 раз больше, т. е. $12\gamma C$ и уточненный баланс энергии (50) должен быть:

$$\Delta W = -\frac{\sigma^2}{4E} \pi c^2 + 12\gamma C, \quad (53)$$

и в конечном счете критические напряжения σ_f :

$$\sigma_f = \sqrt{6} \left(\frac{4\gamma E}{\pi C} \right)^{1/2} \cong 2.45 \sigma_{эр}. \quad (54)$$

Учитывая, что $\sigma_{эр}$ по (52) дает значение $\sigma_{эр} \sqrt{C}$ в 2 раза ниже экспериментального, результат расчета σ_f по (54) можно считать вполне удовлетворительным. Любопытно отметить, что в работе [24] методом компьютерного моделирования было установлено, что переход к нестабильному росту нанотрещины в α -Fe наблюдается при интенсивности напряжений $\sigma_c \sqrt{C}$ примерно в 3 раза превышающей требуемую по Гриффитсу величину.

По-видимому, можно сделать вывод о том, что внесенная выше поправка в величину энергозатрат, необходимых для распространения трещины в твердых телах в виде множителя 6 является вполне оправданной, в силу чего уточненная формула Гриффитса (54) может считаться критерием, необходимым и достаточным для начала спонтанного разрушения тела с трещиной. Нелишне заметить также, что в работах Дж. Нотта в последнее время делаются настойчивые попытки уточнить величину энергозатрат в формуле Гриффитса именно увеличением их в 6 раз путем введения в модель представления о генерировании виртуальных дислокаций на атомно-остром кончике нанотрещины, которые осуществляют упруго-обратимое перемещение на дистанцию $\sim 3b$ (b — модуль вектора Бюргерса) [6]. С

нашей точки зрения такой корректировки в модели Гриффитса нет необходимости, ибо необходимая поправка вносится естественным образом путем адекватного учета энергозатрат, требуемых для образования свободной поверхности трещины после разрыва. Этот избыток энергозатрат в 5γ над необходимой величиной γ представляет собой ни что иное, как энергетический барьер, который система должна преодолеть для того, чтобы перейти в возбужденное энергетическое состояние достаточное для разрыва связей. После разрыва перенапряженных связей $1/6$ избыточной энергии фиксируется в виде потенциальной энергии новой поверхности γ , а 5γ релаксирует в виде теплового или фононового излучения (звука) и т. п.

Вполне понятным и естественным является тот недостаток модели Гриффитса, что она не содержит в себе описания механизма процесса разрушения, чего нельзя в принципе ожидать от термодинамического подхода к задаче. Поэтому теорию Гриффитса нельзя признать физической в полном смысле слова, как иногда это принято считать [2, 25], а скорее, как первый шаг в направлении физической трактовки явления разрушения. В самом деле, такой физический параметр, как γ здесь впервые использован в модели, но лишь как результат разрыва связей, без раскрытия самого механизма явления γ . Но уже сам по себе этот шаг имел революционное и принципиальное значение для создания научной картины природы разрушения твердых тел и этот вклад автора концепции энергетического баланса в создание основ науки о разрушении был по достоинству оценен на 8-м Международном конгрессе по механике разрушения, прошедшем в 1993 г. в Киеве и посвященном 100-летию со дня рождения Аллана Гриффитса [6, 25].

Ограниченность теории Гриффитса лишь применимостью ее к идеально хрупким материалам вполне очевидна и заложена в самой постановке задачи. Однако здесь не все так однозначно. Орован [8] предложил распространить критерий Гриффитса на разрушение вязких материалов путем включения в учет энергозатрат кроме поверхностной энергии γ дополнительно также работу пластической деформации в устье трещины $\gamma_{пл}$ в момент ее страгивания: $\gamma_{эф} = \gamma + \gamma_{пл}$.

Поскольку $\gamma_{пл} \gg \gamma$, то принято считать $\gamma_{эф} = \gamma_{пл}$ и критерий Гриффитса–Орована для вязкого разрушения металлов получает вид:

$$\sigma_p \approx \left(\frac{E\gamma_{эф}}{C} \right)^{1/2}, \quad (55)$$

что имеет смысл лишь грубой оценки σ_p . Но поскольку корректно посчитать величину $\gamma_{эф}$ невозможно, то практически использовать формулу (55) нельзя и на деле ее применяют для решения обратной задачи — по экспериментальным значениям напряжения разрыва материала σ_p и известной длине вязкой трещины из (55) определяют

$\gamma_{зф}$, трактуя ее как меру вязкости стали [8]. Однако такое представление о вязкости лишено ясного физического содержания и поэтому ценность ее для понимания природы нехрупкого («квазихрупкого») разрушения сомнительна. Таким образом, формула (55) лишь по форме напоминает критерий Гриффитса, на самом деле не имеет с ним ничего общего, ибо работа пластической деформации в окрестности острия трещины не может прямо входить в баланс энергии (50) или (53), поскольку лишь косвенно, через создаваемые при этом локальные упругие поля напряжений влияет на плотность упругой энергии в очаге разрыва.

Есть еще одна проблема в трактовке концепции Гриффитса, на которую не принято обращать надлежащего внимания. Речь идет о специфике формы трещины, к которым теория Гриффитса применима. В определенной мере это связано с тем, что сам автор теории в постановке задачи исходит из представления об эллиптической форме трещины [1], тогда как самим фактом привлечения в расчет параметра γ модель уже автоматически подразумевает, что окончание трещины в ее вершине оформлено не в виде некоторого радиуса ρ , а представляет собой плоскости кристалла, постоянно сходящиеся до нормального межатомного расстояния b , где b — параметр кристаллической решетки. Здесь речь может идти лишь об условном понятии радиуса закругления в вершине трещины, когда $\rho \approx b$. На самом деле в критическом состоянии этот радиус значительно больше b , что следует из требования двукратного увеличения объема атома в предельном состоянии при разрыве связей (28). Подробней об этом будет сказано ниже. Именно такие идеально острые, так называемые «силовые» трещины являются единственно пригодными для интерпретации в критериях (52) или (54). Только такого вида трещины следует называть «гриффитсовскими», даже независимо от их фактической длины C , которая может быть самой различной: в хрупких материалах — любой длины, от нано- до микро- и даже макроразмеров (как, например, в опытах А. Гриффитса [1]). В металлах это могут быть только нанотрещины с идеально острыми вершинами, зарождающиеся в местах скопления дислокаций в ходе пластического деформирования [3, 4]. Это именно те трещины, из-за которых реальная прочность материалов оказывается намного ниже теоретической прочности межатомных связей и присутствие которых в технических материалах впервые предположил А. Гриффитс [1].

Вместе с тем макротрещины, имеющие радиус своей вершины $\rho \gg b$, или специально сделанные надрезы даже в идеально хрупких телах не поддаются интерпретации с помощью критерия Гриффитса (52), т. к. затраты упругой энергии в этом случае значительно превышают величину γ и зависят от величины ρ [26].

Сказанного вполне достаточно для вывода о том, что целый ряд проблем фундаментального характера в современной теории раз-

рушения твердых тел оправдывает усилия по разработке иных критериев разрушения, чем тот, который основан на традиционной концепции энергетического баланса в процессе разрушения. Изложенный выше принцип сохранения плотности энергии и вытекающие из него следствия содержат достаточно весомые предпосылки для развития новой концепции разрушения.

2.2. Концепция критической плотности энергии в моделях разрушения твердых тел и металлических материалов

Поскольку разрушение неизбежно связано с наличием упругих деформаций и накоплением упругой энергии в теле, то легко представить себе, что естественным пределом накопления энергии в нагружаемом теле должно быть достижение некоторой критической плотности упругой энергии $\rho_{кр}$. Очевидно, что величина критической плотности энергии существенно зависит от характера решаемой задачи. Например, для разрыва атомных связей критическая плотность энергии значительно выше, чем для разрушения самого материала или элемента конструкции с неким дефектом (трещиной). Поэтому формировать критерий предельного состояния придется для каждого уровня явления отдельно.

Начнем с 1-го, самого основного, атомного уровня. Вполне очевидно, что в любом случае критическая плотность упругой энергии в твердом теле, растягиваемом внешними силами, $\rho_{кр}^{ам}$ не может превышать плотности энергии сил в межатомной связи $\rho_0 = Q_d/V_0$, т. е. $\rho_{кр} \leq \rho_0$. Уже одного этого положения могло бы оказаться вполне достаточно, чтобы еще во времена А. Гриффитса решить задачу разрушения тела с трещиной длиной C и с условным радиусом $\rho \approx b/2$.

Используя для вычисления концентрации напряжений решение Инглиса [27]:

$$\alpha_\sigma = 2\sqrt{\frac{C}{2\rho}}, \quad (56)$$

получим для гриффитсовской трещины (где $2\rho \approx b$):

$$\alpha_\sigma = 2\sqrt{\frac{C}{b}} \quad (57)$$

и

$$\sigma_k = \alpha_\sigma \cdot \sigma. \quad (58)$$

Здесь σ — приложенное к телу нормальное напряжение, σ_k —

максимальное напряжение на кончике трещины. Конечно, для трещин с атомной конфигурацией на конце формулы континуальной механики (57) и (58), строго говоря, непригодны, но необходимые уточнения сделаем позже, а пока в 1-м приближении пренебрежем этим.

Положим, что плотность упругой энергии на кончике трещины достигла предельного значения $\rho_{кр} = \rho_0$:

$$\frac{\sigma_k^2}{2E} = \rho_0. \quad (59)$$

Здесь тоже, строго говоря, надо использовать не табличный модуль E , а его «секущее» значение \bar{E} , но пока оставим и эту некорректность.

Из (58) и (59) имеем:

$$\frac{\sigma^2 \alpha_\sigma^2}{2E} = \rho_0. \quad (60)$$

Перейдем от ρ_0 к γ по (19):

$$\rho_0 = \frac{6\gamma}{b_{эф}},$$

подставив ρ_0 в (60):

$$\sigma^2 = \frac{2E \cdot 6\gamma}{b_{эф} \alpha_\sigma^2} = \frac{12\gamma E}{b_{эф} \cdot 4 \frac{c}{b}} = \frac{3\gamma E}{c}.$$

Далее, принимая, что $b \approx b_{эф}$ и σ есть напряжение разрушения σ_p :

$$\sigma_p \approx \left(\frac{3\gamma E}{c} \right)^{1/2} = \left(\frac{3\pi\gamma E}{\pi c} \right)^{1/2} = 1,53 \left(\frac{4\gamma E}{\pi c} \right)^{1/2} = 1,53 \sigma_{gp}. \quad (61)$$

Как видим, даже столь грубый и некорректный для атомного кончика подход механики, но на базе критерия критической плотности энергии ρ_0 дает, в конечном счете, результат не хуже оригинального гриффитсовского и даже лучше отвечающий экспериментальным данным, чем ф. (52). По всей видимости, все допущенные в расчете некорректности в формуле (60) оказались взаимно скомпенсированными.

Но не будем полагаться на этот расчет, как окончательный, а заметим только, что сама идея критической плотности энергии может оказаться плодотворной и результат (61) лишь хорошо это иллюстрирует. Теперь рассмотрим эти критерии в требуемой постановке.

1. На 1-м, атомном уровне, учитывая $\sigma_{gp} = (1 - 2\nu)\rho_0$ по (34) и $\bar{E} = (1 - 2\nu)^2\rho_0$ по (33), получим:

$$\rho_{кр}^{am} = \frac{\sigma_{np}^2}{2\bar{E}} = \frac{(1-2\nu)^2 \rho_0^2}{2(1-2\nu)^2 \rho_0} = \frac{1}{2} \rho_0 \quad (62)$$

В отличие от (59) критерий равен $\rho_{кр}^{am} = (1/2)\rho_0$, а не ρ_0 . Этот результат понятен в свете вывода (28) о том, что в предельном состоянии, когда избыточная энергия достигает уровня Q_c , увеличение объема тела составляет двукратную величину и плотность энергии становится $(1/2)\rho_0$. Заменяв ρ_0 в (62) через γ по (19) получим критическую плотность энергии для разрыва атомных связей:

$$\rho_{кр}^{am} = \frac{1}{2} \cdot \frac{6\gamma}{b_{эф}} = \frac{3\gamma}{b_{эф}} \quad (63)$$

2. На микро- и макроуровне, когда в теле имеются нанотрещины, критическая плотность 1-го уровня $\rho_{кр}^{am}$ достигается на кончике нанотрещины, а в объеме тела плотность ρ_c окажется намного ниже:

$$\rho_c = \frac{\sigma_f^2}{2E} \quad (64)$$

где $\sigma_f = \sigma \alpha_\sigma^{am}$,

$$\alpha_\sigma^{am} = (1-2\nu)2\sqrt{\frac{C^H}{3,5b}}, \quad (65)$$

\bar{E} по (33): $\bar{E} = (1-2\nu)^2 \rho_0$, C^H — длина нанотрещины. Формула (65) для концентрации напряжений на кончике нанотрещины существенно отличается от классической континуальной (56), во-первых, наличием множителя $(1-2\nu)$, коэффициента жесткости атомных связей, во-вторых, учетом того, что в предельном напряженном состоянии вследствие достижения на кончике нанотрещины предельной упругой деформации $\varepsilon_{np} \approx 2,5$ по (30), удлинение крайней межатомной связи достигает величины $\mu_{np} = 1 + \varepsilon_{np} = 3,5$. Таким образом критическое раскрытие нанотрещины $\delta c \approx 3,5$, что и следует принять в (65) как удвоенный условный радиус кончика трещины в критическом состоянии.

С учетом (65) и (35) для ρ_c получаем:

$$\rho_c = \frac{\sigma_f^2}{2E} = \frac{\sigma_{np}^2}{2E\alpha_\sigma^{am2}} = \frac{(1-2\nu)^2 \rho_0^2 \cdot 3,5b}{2E(1-2\nu)^2 \cdot 4C^H}$$

Заменяем E на $E \approx 3\rho_0$ по (15):

$$\rho_c \approx \frac{3,5\rho_0 b}{24C} \approx 0,15 \frac{\rho_0 b}{C^H} \quad (66)$$

Критическая плотность энергии 2-го уровня для макроскопического твердого тела, содержащего нанотрещины C^H также выражается через плотность энергии связи ρ_0 , но с коэффициентом $b/C^H \ll 1$, что на порядки понижает величину ρ_c в сравнении с $\rho_{кр}^{ам}$.

Из (66) можно получить формулу, пригодную для вычисления прочности материала σ_f :

$$\frac{\sigma_f^2}{2E} = 0,15 \frac{\rho_0 b}{C^H}$$

$$\sigma_f = \left(\frac{0,3 \rho_0 E b}{C^H} \right)^{1/2} = \left(\frac{0,3 \rho_0 \cdot 3 \rho_0 b}{C^H} \right)^{1/2} = \frac{0,95 \rho_0 \sqrt{b}}{\sqrt{C}} \quad (67)$$

или

$$\sigma_f \sqrt{C^H} = 0,95 \rho_0 \sqrt{b} \approx \rho_0 \sqrt{b} \quad (68)$$

Для экспериментов А. Гриффитса [1] по формуле (68) получаем ($\rho_0 \approx E/3 = 21$ ГПа, $b = 5 \cdot 10^{-10}$ м):

$$\sigma_f \sqrt{C} = 0,45 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2},$$

что немного (на ~20%) превышает среднее экспериментальное значение $0,37 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$ [1] и потому результат (66), полученный на основе критерия критической плотности энергии, можно считать вполне приемлемым для использования в качестве расчетной базы для формулировки физической модели прочности реальных материалов, содержащих нанотрещины C^H . Следует подчеркнуть, что при выводе формулы (66) нигде не оговаривалось условие, что в деформируемом теле не может быть пластических деформаций, более того, в случае металлов такие деформации совершенно необходимы для зарождения нанотрещин, без которых разрушение при σ_f по (67) просто невозможно. И в самом критерии (66) нет величин, связанных с эффектами пластической деформации, ибо ρ_0 — есть плотность энергии связи атомов, зависящая от пластической деформации металла не в большей мере, чем модуль E , размер нанотрещин C^H в ходе пластической деформации испытывает лишь небольшую эволюцию, в пределах не более 1,5–2 раза [28]. Поэтому интенсивность напряжения разрушения $\sigma_f \sqrt{C}$ по (68) есть константа для каждого металла в хрупком, квазихрупком или пластичном состоянии, важно лишь, чтобы разрушение происходило от нанотрещин соответствующей длины C^H .

Критерий (66) можно перевести в форму, выражающую его через γ . Для этого числитель и знаменатель в формуле (66) домножим на величину $b_{эф}$, что позволяет выделить в ней γ .

$$\rho_c = \frac{3,5}{6} \frac{\rho_0 b}{4C^H} \frac{b_{эф}}{b_{эф}} = \gamma \frac{3,5}{4} \frac{b}{b_{эф}};$$

Для α -Fe, например, $b = 2,86 \cdot 10^{-10}$ м, $b_{эф} = 2,26 \cdot 10^{-10}$ м, получаем:

$$\rho_c = 1,1 \frac{\gamma}{C^H} \approx \frac{\gamma}{C^H} \quad (69)$$

Произведение $\rho_c C^H = g_c$ представляет собой интенсивность энергии и в этой форме критерии 1-го и 2-го уровней обладают очевидным подобием:

$$g_{кр}^{ам} = \rho_{кр}^{ам} \cdot b_{эф} = 3\gamma \quad (70)$$

$$g_c = \rho_c \cdot C^H \approx \gamma \quad (71)$$

Из (69) сразу следует формула, близкая к формуле Гриффитса (52):

$$\frac{\sigma_f^2}{2E} = 1,1 \frac{\gamma}{C}$$

$$\sigma_f = \left(\frac{2,2\gamma E}{C^H} \right)^{1/2} = \left(\frac{2,2\pi\gamma E}{\pi C^H} \right)^{1/2} = \left(\frac{1,72 \cdot 4\gamma E}{\pi C^H} \right)^{1/2} = 1,3\sigma_{зп}. \quad (72)$$

Таким образом, оба подхода (грубый и корректный) — к проблеме разрушения твердых тел смыкаются на формуле, подобной формуле Гриффитса, что подтверждает правильность концепции критической плотности энергии в механизме разрушения твердых тел. При этом критерий критической плотности энергии является общим для хрупких твердых тел и квазихрупких металлов, основан на простых и ясных физических представлениях и лучше согласуется с экспериментом.

3. Критическая плотность энергии 3-го уровня может быть установлена для разрушения твердых тел, в которых имеется макротрещина c_M или надрез с конечным радиусом в вершине ρ . Плотность упругой энергии Ω_M : $\Omega_M = \sigma_H / (2E)$, где $\sigma_H = \sigma_f / \alpha_\sigma$, $\alpha_\sigma = 2\sqrt{(c_M/\rho)}$, c_M — полудлина внутренней макротрещины или длина поверхностной трещины или надреза. Справедливость приведенных выше соотношений для макромеханики идеально хрупких твердых тел несомненна.

Следовательно:

$$\Omega_M = \frac{\sigma_f^2}{2E\alpha_\sigma^2}. \quad (73)$$

Используя выше полученную формулу (66) имеем:

$$\Omega_m = 0,15 \frac{\rho_0 b}{C^H} \cdot \frac{1}{\alpha_\sigma^2} = 0,15 \frac{\rho_0 b}{C^H} \cdot \frac{\rho}{4c_m} \approx \frac{\gamma}{C^H} \cdot \frac{\rho}{4c_m}. \quad (74)$$

Интенсивность энергии при разрушении твердого тела от макротрещины c_m :

$$G_c = \Omega_m \cdot c_m = \frac{1}{4} \gamma \frac{\rho}{C^H} \quad (75)$$

Поскольку $\rho/C^H \gg 1$, то $G_m \gg \gamma$, т. е. критическая интенсивность энергии при разрушении от макротрещины или надреза с макроскопическим радиусом ρ на порядки превышает γ даже для идеально хрупкого разрушения, чем очень напоминает интенсивность энергии G_{1c} при разрушении вязких материалов в линейной механике разрушения [29]. По-видимому, понятие «вязкости разрушения» G_{1c} в качестве меры вязкости материала требует более тщательного физического осмысления.

2.3. Основы физической природы прочности металлов и сплавов

Для хрупких материалов характеристика прочности и напряжение разрушения совпадают, поэтому модель разрушения можно считать и физической моделью прочности хрупких материалов, как, впрочем, и высокопрочных конструкционных сплавов, обладающих невысокими показателями пластичности (ψ, δ). В связи с этим, полученную выше формулу для напряжения разрушения σ_f (72) можно рассматривать как формулу прочности маловязких материалов. В этом случае критическая плотность упругой энергии ρ_c по (69) испытывает слабую эволюцию, вследствие определенного влияния пластической деформации металла на размер зародышевой трещины [5, 28]. Экспериментально это проявляется в виде немонотонного изменения напряжений разрушения металла в «шейке» S_k при испытании на разрыв в широком интервале температур [28, 30] (Рис. 1). Однако, влияние степени деформации перед разрушением в «шейке» образца ограничено довольно узким интервалом значений S_k , примерно $(1,5-1,7)S_{kmin}$.

Минимальное значение напряжения разрушения, наблюдаемое при температуре хрупко-вязкого перехода T_{np} (Рис. 1), отвечающее некоторой «критической деформации» небольшой величины $I_{kp} \approx 2-5\%$, обладает определенной стабильностью значений размеров нанотрещин C^H , в силу чего экспериментальную проверку критерия (69) удобнее всего осуществлять именно по этому S_{kmin} . В работах

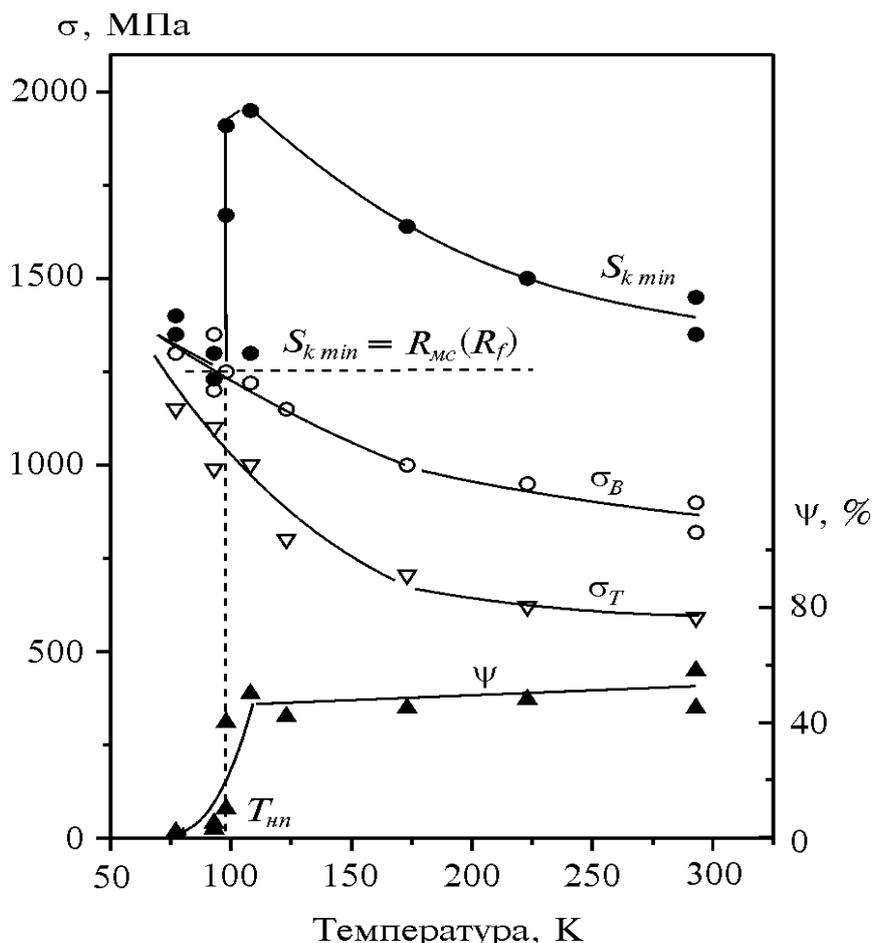


Рисунок 1. Зависимость механических характеристик стали 45 с глобулярным цементитом от температуры испытания [4].

[3, 4, 28] это минимальное напряжение разрушения железоуглеродистых сплавов было названо сопротивлением микро сколу $R_{i \bar{n}}$. Было показано также, что $R_{i \bar{n}}$ обладает свойствами структурно-детерминированной фундаментальной характеристики прочности сплавов, сохраняющей свою независимость от скорости деформирования и вида напряженного состояния [4].

В свете развитой выше концепции разрушения, исходящей из критической плотности упругой энергии ρ_c , никак не связанной с видом излома (хрупкий–вязкий), эту характерную точку S_{min} в спектре значений S разумнее назвать сопротивлением разрыву R_f , или хрупкой прочностью сплава R_x , имея в виду, конечно, квазихрупкий характер разрушения сплава при критической деформации $\epsilon_{кр} \approx 2\%$.

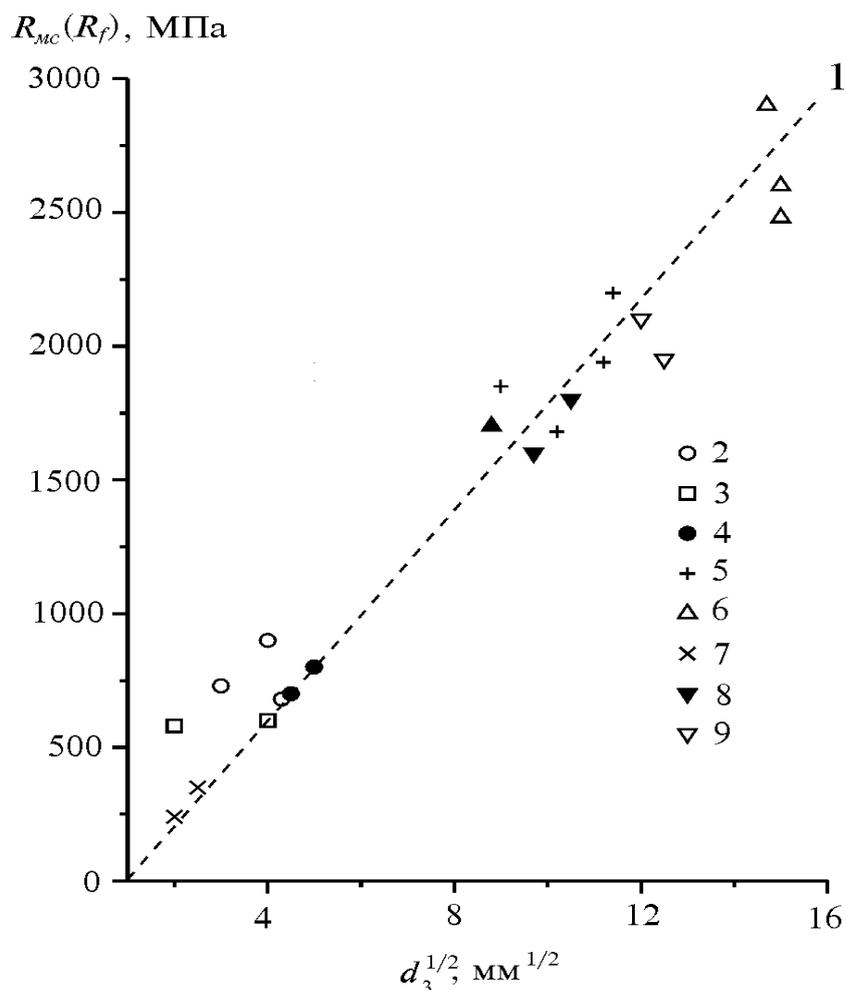


Рисунок 2. Сводный график экспериментальной проверки структурной зависимости сопротивления микросколу R_{mc} (хрупкой прочности R_f): 1 — среднее значение 2 — сталь У8, отжиг; 3 — сталь 08кп, отжиг; 4 — сталь с содержанием 0,3% углерода, отжиг; 5 — сталь с содержанием 0,3% углерода, бейнитирование; 6 — сталь с содержанием 0,3% углерода, закалка + отпуск; 7 — армо-железо; 8 — сталь 70 + нормализация; 9 — сталь 70, патентирование (по [4]).

Так или иначе, систематические эксперименты, выполненные на сталях различного класса, в широком интервале значений параметров структуры (размеров зерен, d_3 , дисперсности глобулярных или пластинчатых карбидных выделений $d_{эл}$, t_u) подтвердили постоянство произведения $R_f \sqrt{C^H} = \text{const}$, если предположить, что размер нанотрещины пропорционален среднему размеру того элемен-
та струк-

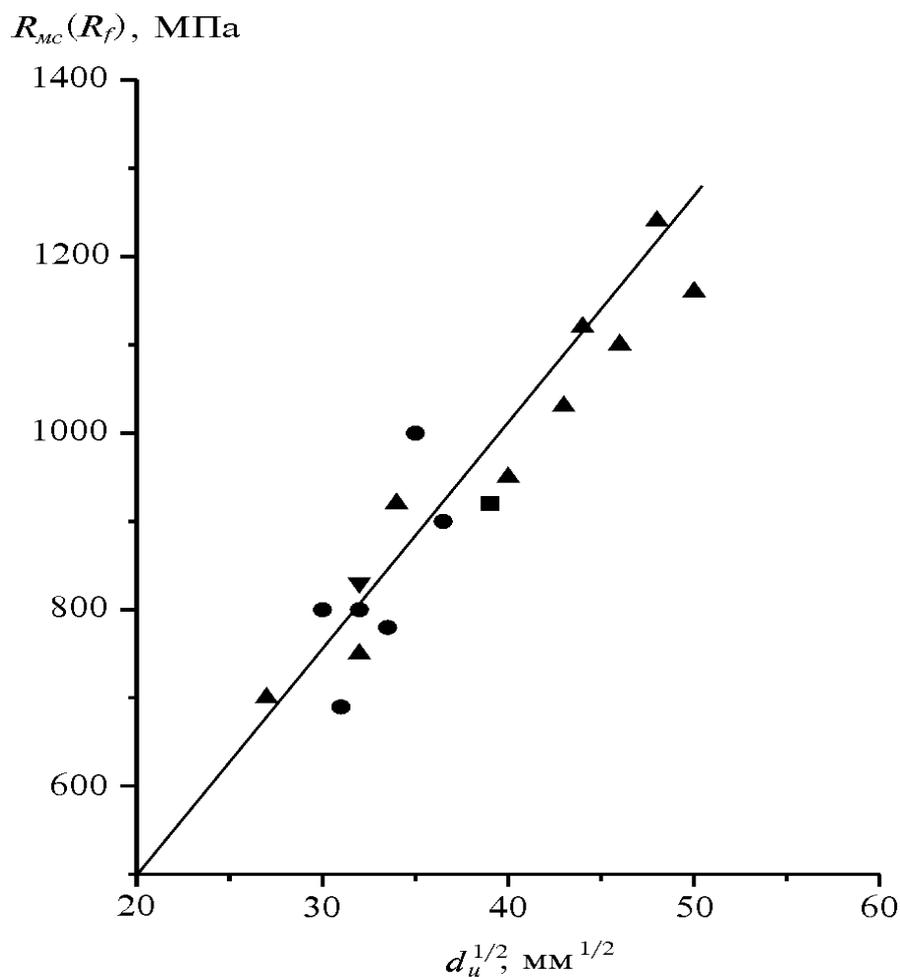


Рисунок 3. Зависимость сопротивления микросколу (хрупкой прочности R_f) от дисперсности цементитных глобул стали, содержащей углерод от 0,04 до 0,8% (по [4]).

туры, который контролирует разрушение, т. е. дает наибольший размер нанотрешины C^h в ряду всех возможных источников микрорастрескивания структурных элементов сплава [4].

На Рис. 2–4 постоянство $R_f \sqrt{C^h} = \text{const}$ демонстрируется прямолинейным характером зависимостей R_f от обратного корня квадратного размера структуры, контролирующего разрушения. Проверка самой константы возможна лишь, если известна конкретная связь между размерами C^h и соответствующим средним размером контролирующего элемента структуры. Обоснование этой количественной связи является центральным местом в любой физической модели

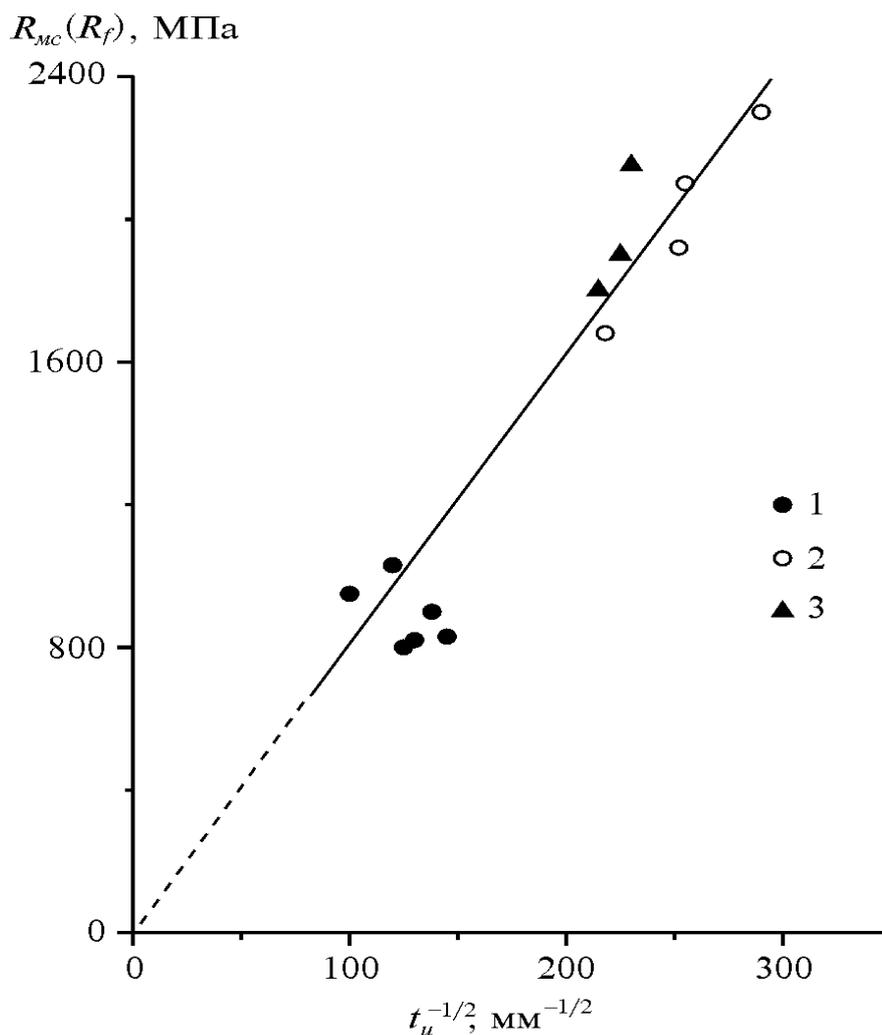


Рисунок 4. Зависимость напряжения микроскола (хрупкой прочности R_f) от толщины цементитных пластин в перлите: 1 — сталь У8, отжиг; 2 — сталь 70, нормализация; 3 — сталь 70, патентирование (по [4]).

разрушения металлических сплавов [4, 5]. Здесь же нам достаточно того, что приведенные зависимости (Рис. 2–4) служат экспериментальным подтверждением критерия (69).

Заметим, что данный критерий применим к любому значению прочности S_k металла на диаграмме Рис. 1, независимо от меры пластичности сплава при разрыве ψ , т. е. σ_f по (72) есть просто оценка среднего значения из всего спектра значений S_k на Рис. 1, независимо от меры пластичности при разрушении. Этого вполне

достаточно для того, чтобы принимать критерий (69) в качестве физической основы модели прочности твердых тел и металлических сплавов, которая, как мы видим, является общей для металлов и хрупких тел.

Таким образом в механизме разрушения хрупких и квазихрупких материалов больше общего, чем различий.

Общее заключается в главном — критерием предельного состояния в общих случаях является критическая плотность упругой энергии ρ_c , создаваемая растягивающим напряжением в момент разрушения σ_f : $\rho_c = \sigma_f^2 / (2E)$. Первое отличие ρ_c для квазихрупкого разрушения материала (выше T_{nn} на Рис. 1) сводится к незначительному (не более, чем в 1,5–2 раза) уменьшению эффективного размера зародышевой нанотрещины C^H . Второе отличие, еще менее значительное, заключается во влиянии статистического поля внутренних микронапряжений в структуре пластически деформированного металла $\Delta\sigma_i$, которое вносит аддитивный вклад в величину σ_f , снижая при этом эффективную величину внешне приложенного напряжения $\sigma_H = \sigma_f - \Delta\sigma_i$ [31].

Таким образом, главный элемент в механизме разрушения вязких и хрупких тел един — критическая плотность упругой энергии ρ_c , поэтому силовые условия разрушения их отличаются не принципиально, во всяком случае это отличие не пропорционально различию в измеряемой при этом общей работе разрушения (в ударной вязкости KCV, например), отсюда актуальность приобретает вопрос о физической природе вязкости конструкционных материалов, которая, по видимому, не может сводиться лишь к мере энергоемкости их разрушения, а требует более тщательного уяснения роли, которую наряду с работой пластической деформации может играть в природе этой характеристики и плотность упругой энергии в момент разрушения металла при температуре выше хрупко-вязкого перехода [32].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сложность проблемы разрушения конструкционных материалов и изделий из них обуславливается многоуровневым характером явлений, происходящих в твердых телах при их механическом деформировании.

На макроуровне эти процессы определяются особенностями влияния напряженно-деформированного состояния на механические свойства материала, особенно в областях сильной локализации пластической деформации. На микроструктурном уровне в процессе деформирования развивается сложная система процессов, определяющих эволюцию важнейших механических свойств материала с данной структурой. Это предмет физического материаловедения. На

атомном уровне в структуре металла создаются такие локальные области перенапряжений, в которых решающее значение имеют сугубо физические критерии разрыва атомных связей.

Поскольку все эти процессы развиваются одновременно на всех уровнях и их закономерности переплетаются в сложном узле происходящих явлений, то разобраться в проблеме разрушения металлического изделия или сооружения можно, лишь расчленив этот сложный процесс по меньшей мере на три самостоятельных уровня явлений, в каждом из которых может быть сформулирован свой критерий предельного состояния — макроскопический, микроструктурный и атомный. Но, как было показано выше, в данном подходе в основе каждого критерия содержится общий фундаментальный параметр предельного состояния — плотность энергии связи атомов ρ_0 . Установлено, что на каждом уровне имеется своя критическая плотность накопленной в теле упругой энергии, зависящая от фундаментальной константы ρ_0 и линейного размера (длины) той полости в теле, от которой возникает разрушение. Критическая плотность резко падает при переходе от атомного к микро- и далее, к макромасштабу дефекта: $\rho_0 > \rho_c > \Omega_m$. Примечательно, что интенсивность выделения упругой энергии при единичном шаге прирастания полости (трещины) одинакова для атомного и микроскопического уровня — $g_{am} = g_c = 3\gamma$, что объяснимо в свете единой природы разрушения в этих двух случаях — состоящей в разрыве межатомных связей. Для макротрещины (надреза) с радиусом $\rho \gg b$ критическая интенсивность упругой энергии G_c сразу превышает величину 3γ на множитель типа ρ/C^H , т. е. макротрещину с радиусом порядка размера нанотрещины C^H (например, порядка диаметра карбидного или иного выделения в сплаве) — $\rho \approx C^H$ можно считать идеально острой в макроскопическом смысле, ибо ей соответствует минимальная критическая интенсивность выделения энергии $\approx 3\gamma$ и минимальная прочность изделия с трещиной данной длины C_m . Можно предположить, что именно таковыми являются типичные трещины усталости.

Критерий критической плотности энергии отличается от критерия баланса энергий по Гриффитсу более корректным учетом необходимых энергозатрат при разрыве атомных связей, что позволяет количественно уточнить классический критерий Гриффитса на множитель порядка 6, обеспечивающий лучшее согласие теории с опытом. Однако главным преимуществом критерия ρ_c является его универсальность, т. е. одинаковая его применимость для разрыва атомных связей в прямом разрушении и на кончике атомно-острой нанотрещины, что свидетельствует об общности микромеханизмов разрушения в этих случаях. И, наконец, важнейшим достоинством критерия ρ_c для описания процесса разрушения твердых тел является то принципиальное обстоятельство, что критическая плотность энергии ρ_c или интенсивность выделения упругой энергии при разрушении материала g_c не зависят от того в хрупком или квазихрупком (вязком)

состоянии находится деформируемое тело, если разрушающая его нанотрещина имеет заданную величину C^H . Следовательно, критерий p_c (или $g_c = p_c C^H$) одинаково справедлив для хрупких твердых тел и металлических конструкционных материалов. Уже одного этого обстоятельства достаточно для того, чтобы считать оправданным поиск более современных критериев разрушения, отличающихся от классического критерия Гриффитса, служившего основой всех теорий разрушения на протяжении всего XX века.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. A. Griffith, *Phil. Trans. Roy. Soc. A*, **221**: 163 (1920).
2. A. H. Cottrell, *Fracture. A Topical Encyclopedia of Current Knowledge* (Malabar, Florida: Kriger Publishing Company: 1998), p. 368.
3. Ю. Я. Мешков, *Физические основы разрушения стальных конструкций* (Киев: Наукова думка: 1981).
4. Ю. Я. Мешков, Г. А. Пахаренко, *Структура металла и хрупкость стальных изделий* (Киев: Наукова думка: 1985).
5. С. А. Котречко, *Металлофизика и новейшие технологии*, **16**, № 10: 37 (1994).
6. J. F. Knott, *Физико-химическая механика материалов*, **29**, № 3: 42 (1993).
7. E. Orowan, *Fatigue and Fract. of Met. MIT Symposium* (New York: 1950), p. 139.
8. E. Orowan, *Welding J.*, **34**: 157 (1955).
9. J. D. Eshelby, *J. Appl. Phys.*, **25**: 255 (1954).
10. Ю. Я. Мешков, *Металлофизика и новейшие технологии*, **18**, № 5: 60 (1996).
11. Дж. Кэй, Т. Леби, *Таблицы физических и химических постоянных* (Москва: Физматгиз: 1962).
12. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов* (Москва–Ленинград: Госиздат технико-теоретич. литературы: 1950).
13. М. В. Белоус, М. П. Браун, *Физика металлов* (Киев: Вища школа: 1986).
14. Б. Г. Лившиц, Г. С. Крапошин, Я. А. Линецкий, *Физические свойства металлов и сплавов* (Москва: Металлургия: 1980).
15. Л. Н. Лариков, *Вопросы физики металлов и металловедения* (Киев: Наукова думка: 1967), с. 35.
16. A. Seeger and H. Stehle, *Z. Phys.*, **146**: 242 (1956).
17. М. А. Штремель, *Прочность сплавов. Дефекты решетки* (Москва: Металлургия: 1982).
18. Б. Я. Пинес, *Очерки по металлофизике* (Харьков: Изд-во Харьковского университета: 1951), с. 98.
19. Н. Макмиллан, *Идеальная прочность тел. Механика, атомистика разрушения* (Москва: Мир: 1987).
20. М. Л. Бернштейн, В. А. Займовский, *Структура и механические свойства металлов* (Москва: Металлургия: 1970).
21. В. С. Иванова, *Усталостное разрушение металлов* (Москва: Металлургия: 1983).
22. А. И. Петров, В. И. Бетехтин, *Физ. мет. металловед.*, **34**, вып. 1: 39 (1972).
23. J. E. Mackenzie, *Phil. Doct. Thesis* (Bristol: 1949).
24. M. Mullins and M. A. Dokainish, *Phil. Mag. A*, **46**, No. 5: 771 (1982).

25. С. Я. Ярема, А.-А. Гриффитс (1893–1963), *Физико-химическая механика материалов*, **29**, № 3: 7 (1993).
26. Ю. Я. Мешков, *МиТОМ*, **1**: 30 (1996).
27. С. Е. Inglis, *Trans. Roy. Inst. Nav. Archit.*, **55**: 219 (1913).
28. Ю. Я. Мешков, Т. Н. Сердитова, *Разрушение деформированной стали* (Киев: Наукова думка: 1989).
29. Д. Броек, *Основы механики разрушения* (Москва: Высшая школа: 1980).
30. Дж. Хан, Б. Авербах, В. Оуэн, М. Козн, *Атомный механизм разрушения* (Москва: Гос. НТИ чер. и цвет. металл.: 1963), с. 109.
31. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, К. П. Рябошапка, Н. Н. Стеценко, *Металлофизика и новейшие технологии*, **17**, № 1: 51 (1995).
32. Г. П. Зими́на, С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, *Сб. «Электронная микроскопия и прочность материалов»*. Труды ИПМ НАН Украины (Киев: ИПМ НАН Украины: 1999), вып. 10, с. 54.