

## ОБ ОДНОЙ МОДЕЛИ ПОТЕРИ УСТОЙЧИВОСТИ ПЛОСКОГО ИДЕАЛЬНОГО КРИСТАЛЛА ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

Как показывает эксперимент, одним из видов разрушения идеального кристалла при растяжении является сдвиговое разрушение, которое характеризуется образованием систем скольжения [1, 2], происходящим в случаях, когда фактор Шмида отличен от нуля, т. е. когда направление растяжения составляет с плоскостью скольжения угол  $5-85^\circ$ .

Но можно ожидать, что при некоторых условиях пластическая деформация будет развиваться, когда фактор Шмида равен нулю. Такой случай, когда направление растяжения перпендикулярно плоскости скольжения, будем называть предельным, теоретические исследования которого проведены в [3, 4], где изучалась потеря устойчивости плоского идеального кристалла при растяжении, атомная решетка которого соответствовала расположению атомов в плоскости (111) металла, имеющего гранецентрированную кубическую структуру, или в плоскости (0001) металла, имеющего гексагональную плотноупакованную структуру. В качестве потенциала межатомного взаимодействия был выбран потенциал Леннарда — Джонса, в основном характеризующий взаимодействие атомов в инертных газах.

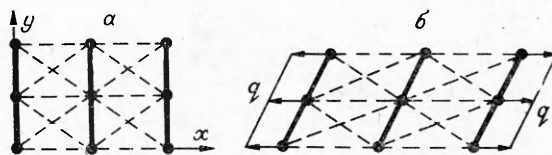
В данной работе строится модель, характеризующая потерю устойчивости плоского идеального кристалла при растяжении в предельном случае, атомная решетка которого соответствует расположению атомов в плоскости (110) металла с гранецентрированной кубической структурой. При исследовании на устойчивость потенциал межатомного взаимодействия берется в самом общем виде [4, 5].

Рассмотрим плоский идеальный кристалл с трансляцией решетки  $a$  вдоль оси  $Ox$  и  $a/\sqrt{2}$  вдоль оси  $Oy$ . Кристалл растягивается равномерно распределенной нагрузкой интенсивности  $q$  вдоль оси  $Ox$  (рис. 1).

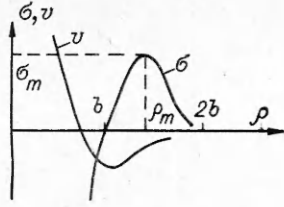
Предположим, что силы взаимодействия между атомами потенциальные и взаимодействуют только соседние атомы. При нагружении кристалла атомы, лежащие на вертикальной прямой (рис. 1, а), относительно друг друга не смещаются и все время остаются на одной линии (рис. 1, б). Тогда плоский кристалл можно заменить механической моделью, состоящей из вертикальных невесомых стержней с сосредоточенными массами, соединенных между собой нелинейными пружинами (штриховые линии), точки крепления которых совпадают с положением атомов в атомной решетке. Сила, действующая на атом со стороны пружины, равна силе межатомного взаимодействия  $\sigma$ , а потенциальная энергия пружины равна межатомному потенциалу  $v$  [4, 5]. Вид зависимостей  $\sigma$  и  $v$  от межатомного расстояния  $\rho$  в кристалле с трансляцией решетки  $b$  приведен на рис. 2 ( $\sigma_m$  — максимальная сила взаимодействия двух атомов или временное сопротивление). Следовательно, деформацию кристалла при нагружении представим в виде горизонтального смещения стержней и их поворота на угол  $\theta$  в плоскости чертежа, как показано на рис. 1, б.

При наложенных выше ограничениях нетрудно видеть, что поведение всего кристалла характеризуется поведением элементарной ячейки, состоящей из четырех атомов и трех нелинейных пружин (рис. 3, а). При нагружении ячейки приведенной силой  $P$  ее положение определим с помощью обобщенных координат  $r$  и  $\theta$  (рис. 3, б).

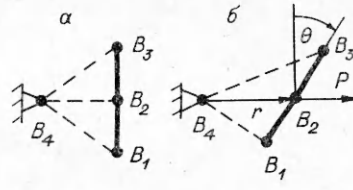
Рассмотрим поведение ячейки при нагружении силой  $P$ . Следует ожидать, что при небольших значениях  $P$  стержень  $B_1B_3$  имеет единственное устойчивое положение равновесия  $\theta = 0$ . При достижении  $P$  некоторой критической величины  $P_c$  возможны три положения равновесия  $B_1B_3$ : одно неустойчивое, соответствующее  $\theta = 0$ , и два устойчивых,



Р и с. 1



Р и с. 2



Р и с. 3

при которых  $B_1B_3$  составляет с вертикалью угол  $\theta = \pm\theta_c \approx 0$ . Эта точка есть точка ветвления или бифуркации. При дальнейшем нагружении ячейка имеет два устойчивых положения равновесия ( $\theta = +\theta_1 \approx 0$ ) и одно неустойчивое ( $\theta = 0$ ).

Аналогично ведет себя кристалл при медленном нагружении: при возрастании  $q$  от нуля до  $q_c$  вертикальные цепочки атомов перемещаются вдоль оси  $Ox$  параллельно оси  $Oy$ , при достижении  $q$  критического значения  $q_c$  вертикальные цепочки атомов повернутся на угол  $\theta_c$  или  $-\theta_c$  и в дальнейшем будут развиваться сдвиговые деформации.

Используя теоремы Лагранжа — Дирихле, Ляпунова и Четаева [6] и методику [4, 7], выведем условия потери устойчивости атомной решетки. Запишем потенциальную энергию  $\Pi$  элементарной ячейки как

$$\Pi = \sum_{s=1}^3 v_s(\rho_s) - Pr,$$

где  $v_s(\rho_s)$  — потенциальная энергия взаимодействия атома  $B_4$  с атомами  $B_s$  ( $s = 1, 2, 3$ );  $\rho_1 = B_1B_4 = \sqrt{a^2/2 + r^2} - ar\sqrt{2}\sin\theta$ ;  $\rho_2 = B_2B_4 = r$ ;  $\rho_3 = B_3B_4 = \sqrt{a^2/2 + r^2} + ar\sqrt{2}\sin\theta$ . Условия равновесия имеют вид

$$(1) \quad \Pi_r = \sum_{s=1}^3 \frac{\partial v_s}{\partial \rho_s} \frac{\partial \rho_s}{\partial r} - P = 0, \quad \Pi_\theta = \sum_{s=1}^3 \frac{\partial v_s}{\partial \rho_s} \frac{\partial \rho_s}{\partial \theta} = 0.$$

Здесь индексы, стоящие у функции  $\Pi$ , показывают, что берутся частные производные по соответствующим переменным.

Значение потенциальной энергии  $\Pi$  в положении равновесия определяют его устойчивость или неустойчивость [6]: если в положении равновесия потенциальная энергия принимает минимальное значение, то положение равновесия устойчиво; если в положении равновесия потенциальная энергия не имеет минимума, то, согласно теоремам Ляпунова и Четаева, положение равновесия неустойчиво. Наличие минимума  $\Pi$  устанавливается через вторые частные производные по обобщенным координатам. Выпишем матрицу  $A$ , элементами которой являются коэффициенты устойчивости (вторые частные производные от  $\Pi$  по обобщенным координатам):

$$A = \begin{bmatrix} \Pi_{rr} & \Pi_{r\theta} \\ \Pi_{\theta r} & \Pi_{\theta\theta} \end{bmatrix}.$$

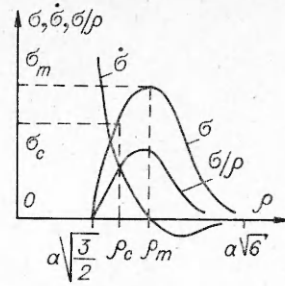
Если матрица  $A$  знакоопределенная положительная, то рассматриваемое положение равновесия устойчиво; точка, в которой нарушается это условие, есть точка бифуркации.

Вычислим коэффициенты устойчивости:

$$(2) \quad \Pi_{rr} = \sum_{s=1}^3 \left[ \frac{\partial^2 v_s}{\partial \rho_s^2} \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial r} \right)^2 + \frac{\partial v_s}{\partial \rho_s} \frac{\partial^2 \rho_s}{\partial r^2} \right],$$

$$\Pi_{r\theta} = \sum_{s=1}^3 \left[ \frac{\partial^2 v_s}{\partial \rho_s^2} \frac{\partial \rho_s}{\partial r} \frac{\partial \rho_s}{\partial \theta} + \frac{\partial v_s}{\partial \rho_s} \frac{\partial^2 \rho_s}{\partial r \partial \theta} \right], \quad \Pi_{\theta\theta} = \sum_{s=1}^3 \left[ \frac{\partial^2 v_s}{\partial \rho_s^2} \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\partial v_s}{\partial \rho_s} \frac{\partial^2 \rho_s}{\partial \theta^2} \right].$$

Так как нас интересует устойчивость вертикального положения стержня  $B_1B_3$ , исследуем на устойчивость положение равновесия  $\theta = 0$ . Значения производных в соотношениях (2) берем при  $\theta = 0$ . В силу симметрии рассматриваемой ячейки при  $\theta = 0$   $\Pi_{r\theta} = \Pi_{\theta r} = 0$ , поэтому устойчивость определяется знаками  $\Pi_{rr}$  и  $\Pi_{\theta\theta}$ : если  $\Pi_{rr} > 0$  и  $\Pi_{\theta\theta} > 0$ , то положение равновесия устойчиво; при нарушении одного из неравенств положение равновесия переходит из устойчивого в неустойчивое. Точка, в которой  $\Pi_{\theta\theta} = 0$ , является точкой, где начинает поворачиваться стержень  $B_1B_3$ , т. е. в плоском кристалле начнут развиваться сдвиговые деформации.



Р и с. 4

Подставив значения  $\rho_s$  и их производных в (2), получаем

$$(3) \quad \Pi_{rr} = \dot{\sigma}_* + \frac{2}{\rho^2} \left( r^2 \dot{\sigma} + \frac{a^2}{2\rho} \sigma \right), \quad \Pi_{\theta\theta} = \frac{a^2 r^2}{\rho^2} \left( \dot{\sigma} - \frac{\sigma}{\rho} \right).$$

Здесь  $\rho_1 = \rho_3 = \rho = \sqrt{a^2/2 + r^2}$ ;  $\rho_2 = r$ ;  $\partial v_1/\partial \rho_1 = \partial v_3/\partial \rho_3 = \sigma$ ;  $\partial v_2/\partial \rho_2 = \dot{\sigma}_*$ ;  $\partial^2 v_1/\partial \rho_1^2 = \partial^2 v_3/\partial \rho_3^2 = \dot{\sigma}$ ;  $\partial^2 v_2/\partial \rho_2^2 = \sigma_*$ .

Из соотношения (3) следует, что при растяжении  $\Pi_{rr}$  не обращается в нуль ни при каких значениях  $r$ . Теоретически это условие осуществить возможно, а именно:  $\Pi_{rr} = 0$ , практически это означает нарушение атомных связей, так как  $r > r_m = \sqrt{\rho_m^2 - a^2/2}$ , т. е. разрушение кристалла препятствует выполнению условия  $\Pi_{rr} = 0$ .

Величина  $\Pi_{\theta\theta}$  обращается в нуль при  $\rho = \rho_c$ , где  $\rho_c$  — решение уравнения

$$(4) \quad \dot{\sigma} - \sigma/\rho = 0.$$

Следовательно, поворот стержня  $B_1B_3$  произойдет при достижении обобщенной координаты  $r$  значения  $r_c = \sqrt{\rho_c^2 - a^2/2}$ . Так как явный вид межатомного взаимодействия известен не всегда и аналитическое решение (4) найти затруднительно, для наглядности на рис. 4 приведено геометрическое решение (4). Из вида функции  $\sigma(\rho)$  вытекает, что  $\rho_c < \rho_m$ , и, значит, сдвиговые деформации появятся прежде, чем сила взаимодействия достигнет временного сопротивления  $\rho_m$ .

Определив  $\rho_c$  из уравнения (4) и подставив полученное значение в (1), находим критическую приведенную силу  $P_c = \sigma_* + \frac{2r}{\rho} \sigma$  ( $r = r_c$ ,  $\rho = \rho_c$ ,  $\dot{\sigma}_* = \dot{\sigma}_*(r_c)$ ,  $\sigma = \sigma(\rho_c)$ ).

Проведенные теоретические вычисления показывают, что сдвиговые деформации при некоторых условиях могут развиваться и в предельном случае, т. е. когда направление растяжения перпендикулярно плоскости скольжения. На первом этапе нагружения ( $q < q_c$ ) деформация преимущественно развивается за счет изменения взаимного расположения вертикальных цепочек атомов, на втором ( $q = q_c$ ) происходит поворот плотно упакованных цепочек с нарушением симметрии кристалла, и в дальнейшем деформация развивается за счет сдвиговых смещений.

**П р и м е ч а н и е.** Приведенные рассуждения и выкладки справедливы для случая, когда  $\sigma_*(r_c) < \sigma_{*m}$  ( $\sigma_{*m}$  — временное сопротивление атомов  $B_2$  и  $B_4$ ).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Хоннкомб Р. Пластическая деформация металлов. — М.: Мир, 1972.
2. Carrard M., Martin J. L. A study of (001) glide Al single crystals // Philosophical magazine. Ser. A. — 1987. — V. 56, N 3.
3. Thompson J. M. T., Sherrock P. A. Bifurcational instability of an atomic lattice // J. Mech. and Phys. solids. — 1975. — V. 23, N 1.

4. Томпсон Дж. М. Т. Неустойчивости и катастрофы в науке и технике.— М.: Мир, 1985.
5. Брок Д. Основы механики разрушения.— М.: Высш. шк., 1980.
6. Меркин Д. Р. Введение в теорию устойчивости движения.— М.: Наука, 1971.
7. Пановко Я. Г., Губанова И. И. Устойчивость и колебания упругих систем.— М.: Наука, 1987.

г. Свердловск

Поступила 26/II 1990 г.,  
в окончательном варианте — 19/IX 1990 г.

УДК 539.216.1 : 669.782

С. А. Антипов, И. Л. Батаронов, А. И. Дрожжин,  
А. П. Ермаков, А. М. Рошупкин

### КИНЕТИКА РОТАЦИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ РАСТЯЖЕНИЕМ НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ

Исследована кинетика спонтанного закручивания нитевидных кристаллов (НК) Si при растяжении на различных масштабных уровнях. На базе кинетического уравнения пластической деформации предложено феноменологическое описание кинетики крупномасштабного закручивания НК.

Пластическая деформация НК существенно отличается от массивных монокристаллов [1] и характеризуется развитием ряда неустойчивостей, одной из которых является эффект закручивания НК при растяжении [2—4]. В настоящей работе с целью выяснения кинетической сущности указанного эффекта предложено обобщение основного кинетического уравнения пластической деформации с учетом закручивания НК и проанализировано влияние на кинетику закручивания масштабного фактора, напряжений растяжения и температуры испытания.

**Экспериментальная часть.** В качестве образцов использовали исходно бездислокационные НК p-Si [111] диаметром  $d = (5 \div 200) \cdot 10^{-6}$  м и рабочей длиной  $l_p = (1 \div 5) \cdot 10^{-3}$  м. Кинетические кривые закручивания НК вокруг оси [111] (ротационный эффект) в процессе ползучести под действием одноосной нагрузки растяжением исследовали на универсальной установке [5] в вакууме не хуже  $5 \cdot 10^{-3}$  Па при температурах 1400—1600 К по методикам [2, 5].

На рис. 1 представлено влияние масштабного фактора на кинетические кривые  $I-3$  и интегральный угол  $4$  закручивания НК Si:  $d \cdot 10^6$ , м:  $I-5, 6; 2-15; 3-24; \sigma \cdot 10^{-6}$ , Па:  $I-3-4,4; 4-7; T, K: I-3-1420; 4-1375$ . На рис. 2 показано влияние температуры на кинетические кривые  $I-3$  и интегральный угол  $4$  закручивания НК Si:  $d \cdot 10^6$ , м:  $I-4-24; \sigma \cdot 10^{-6}$ , Па:  $4,4; T, K: I-1375, 2-1475, 3-1575$ . Масштаб в начале координат увеличен в 50 раз. Влияние напряжений растяжения на кинетические кривые  $I-3$  и интегральный угол  $4-5$  закручивания НК Si представлено на рис. 3:  $d \cdot 10^6$ , м:  $I-5-10; T, K: I-5-1457; \sigma \cdot 10^{-6}$ , Па:  $I-1,5; 2-25,2; 3-156,0$ . Видно, что полученные кривые существенно отличаются от результатов [6—8].

Наиболее ярко ротационный эффект наблюдается в НК диаметром  $d_m \sim (15-25) \cdot 10^{-6}$  м, а по мере уменьшения или увеличения диаметра эффект убывает (рис. 1, кривая 4). Уменьшение эффекта при  $d > d_m$  связано с ростом крутильной жесткости НК  $\sim d^4$ , а при  $d < d_m$  обусловлено приближением  $d$  к характерной длине  $\Lambda$  линий скольжения, что приводит к локализации пластической деформации в узкой полосе скольжения, в которой развивается «сверхпластичность» НК [8]. При этом, поскольку мгновенное значение угла поворота определяется только дислокациями, присутствующими в НК, уменьшение их количества в результате локализации приводит к уменьшению угла закручивания. Таким образом,  $d_m \sim 5 \div 10\Lambda$ , что также согласуется с результатами [9] по пластичности НК. При малых осевых нагрузках заметно развита скачкообразность процесса. При повышении температуры (рис. 2) и увеличении осевой нагрузки (рис. 3) в НК обнаруживается тенденция к более ярко выраженному однонаправленному кручению. Последнее обусловлено резкой локализацией