

4. The effective values of the dipole moments of electronic components are calculated $3l^3 A'_g \rightarrow 2p^3 A''_u H_2$.

REFERENCES

1. Moncuit D. These. Universite de Paris. / D. Moncuit // . Paris.: - 1981. -156 p.
2. Varshalovich D. AA., Moskalev am., Khersonskiy V. K. Quantum theory of angular momentum. / D. A.Varshalovich and others. / - L.: 1975 . P. 493 .
3. Trofimova T. I. Course of physics. / T. I. Trofimova // Moscow.:Publishing center "Academy", - 2008. - 17 reprint.- P. 560.
4. Moscow engineering physics Institute (state University) ; Col.: V. F. Petrunin et al.: physicochemistry of ultradisperse (NASo-) systems, Moscow: MEFPhI, 2006
5. Samoilenko P. I.: Fizika [Physics], Moscow: Akademiya, 2006
6. Grabovsky R. I.: Course of physics. Saint Petersburg: LAN Publ., 2005
7. Blokhintsev D. I.: Kvantovaya Mekhanika [Quantum mechanics], Moscow state University, 1988
8. Radunskaya street And.Л.: Die Legende vom Erfolg: Talente, Traume und Atome. - Lepzig: Urania, 1986
9. Landau, L. Teoreticheskaya Fizika V 10 TT. T. 4. Kvantovaya elektrodinamika / L. Landau, E. Lifshits. - Moscow: Fizmatlit, 2006. - 720 p.
10. Eikhenvald, A. A. Theoretical physics: Electromagnetic field. Eikhenvald, Moscow: Librokom Либрокомpublishing house, 2011, 376 p.

К ВОПРОСУ ОБ ОБРАТНОМ ЭФФЕКТЕ ХОЛЛА-ПЕТЧА

Юров Виктор Михайлович

кандидат физ.-мат. наук, доцент

Гученко Сергей Алексеевич

докторант PhD

Салькеева Айжан Каришовна

кандидат физ.-мат. наук, доцент

Кусенова Асия Сабиргалиевна

кандидат физ.-мат. наук, доцент

Карагандинский университет имени Е.А. Букетова,
Казахстан, Караганда

TO THE QUESTION ABOUT HALLA-PATCH BACK EFFECT

Yurov Viktor

Candidate of phys.-mat. sciences, associate professor

Guchenko Sergey

PhD student

Salkeeva Aizhan

Candidate of phys.-mat. sciences, associate professor

Kusenova Asiya

Candidate of phys.-mat. sciences, associate professor

Karaganda University named after EA. Buketov,

Kazakhstan, Karaganda

АННОТАЦИЯ

До настоящего времени дискутируется эмпирический закон Холла-Петча и его обратный эффект. Предложены многочисленные модели и показана неисчерпаемость глубокой концепции Холла-Петча. В рамках настоящей работы, мы хотим показать, что обратный эффект Холла-Петча наблюдается не только в поликристаллах, но присущ и атомарно-гладким нанокристаллам. Для определения толщины поверхностного слоя атомарно-гладких нанокристаллов использовалась размерная зависимость физического свойства. Для предела текучести атомарно-гладких нанокристаллов нами получено уравнение, которое по форме совпадает с уравнением Холла – Петча. Однако коэффициенты пропорциональности в обеих формулах различаются. В рассматриваемом случае поведение предела текучести атомарно-гладких нанокристаллов определяется также величиной их поверхностного натяжения. Если в полученном уравнении для поверхностного натяжения учесть формулу Русанова А.И., то мы получим обратный эффект Холла-Петча.

Таким образом, обратный эффект Холла – Петча обусловлен размерной зависимостью поверхностного натяжения атомарно-гладких нанокристаллов и в конце концов зависит от атомного радиуса, который определяет толщину поверхностного слоя наноструктуры.

ABSTRACT

To date, the empirical Hall-Petch law and its inverse effect have been debated. Numerous models have been proposed and the inexhaustibility of the deep Hall – Petch concept has been shown. In the framework of this work, we want to show that the inverse Hall-Petch effect is observed not only in polycrystals, but also inherent in

atomically smooth nanocrystals. To determine the thickness of the surface layer of atomically smooth nanocrystals, we used the size dependence of the physical property. For the yield strength of atomically smooth nanocrystals, we have obtained an equation that coincides in shape with the Hall - Petch equation. However, the proportionality coefficients in both formulas are different. In the case under consideration, the behavior of the yield strength of atomically smooth nanocrystals is also determined by their surface tension. If the obtained equation for surface tension takes into account the formula of A.I. Rusanov, then we get the inverse Hall-Petch effect. Thus, the inverse Hall - Petch effect is due to the size dependence of the surface tension of atomically smooth nanocrystals and ultimately depends on the atomic radius, which determines the thickness of the surface layer of the nanostructure.

Ключевые слова: эффект Холла-Петча, атомарно-гладкий нанокристалл, размерность.

Key words: Hall-Petch effect, atomically smooth nanocrystal, dimension.

Введение. Приведенный в работе [1] обзор основных экспериментальных результатов, касающихся пластичности и прочности микро - и наноматериалов, и их анализ с дислокационно-кинетических позиций показывают, что и прямое, и обратное соотношения Холла-Петча являются результатом дислокационных процессов, протекающих в объеме и границах зерен.

Статья [2] носит критический и обзорно-обобщающий характер. В работе в рамках объема статьи рассмотрено современное состояние вопроса по проблеме Холла-Петча. Дана классификация поликристаллического агрегата зерен по размерам. Описаны основные композитные модели зерен. Классифицированы модели, позволяющие получить соотношение Холла-Петча для мезо и микрочерен. Рассмотрена зависимость коэффициента Холла-Петча от среднего размера зерна. Расставлены акценты на всех нерешенных проблемах. В работах [3, 4], удастся показать, во-первых, перспективы интенсивных исследований механических характеристик нанокристаллов, во-вторых, важность таких работ для физики прочности и, в-третьих, неисчерпаемость глубокой концепции Холла-Петча. Здесь же сделана оценка толщины границ зерна в размере 0,5-1 нм.

В работе [5] сделан вывод, что обнаружено согласование картин локализации пластического течения в поликристаллическом алюминии с характером выполнения соотношения Холла-Петча

в нем. В работе [6] описана модель, позволяющая рассчитывать параметры соотношения Холла-Петча (величину коэффициента зернограницного упрочнения K и предел макроупругости для нано- и микрочеренных металлов, полученных методами интенсивного пластического деформирования.

Примером компьютерного моделирования является работа [7], где в рамках инженерии границ зерен выявлены два типа ротационно-волновых потоков, которые определяются углом разориентации смежных зерен. Первый тип зернограницных потоков развивается в малоугловых границах и генерирует в объеме зерен дислокации, определяющие прямой эффект Холла-Петча. Второй тип зернограницных потоков развивается в большеугловых границах и приводит к обратному эффекту Холла-Петча.

В рамках настоящей работы, мы хотим показать, что обратный эффект Холла-Петча наблюдается не только в поликристаллах, но присущ и атомарно-гладким кристаллам.

Описание модели

В работах [8, 9] обобщена, предложенная нами, модель поверхностного слоя атомарно-гладких металлов. Эта модель отвечает многоуровневой модели в мезомеханике [10]. Схематически модель представлена на рис. 1. Слой де Бройля $d_0 = \lambda_{дБ} = h/p$ для металлов составляет от 0,01 до 0,1 нм. В этом слое начинаются квантовые размерные эффекты [11].

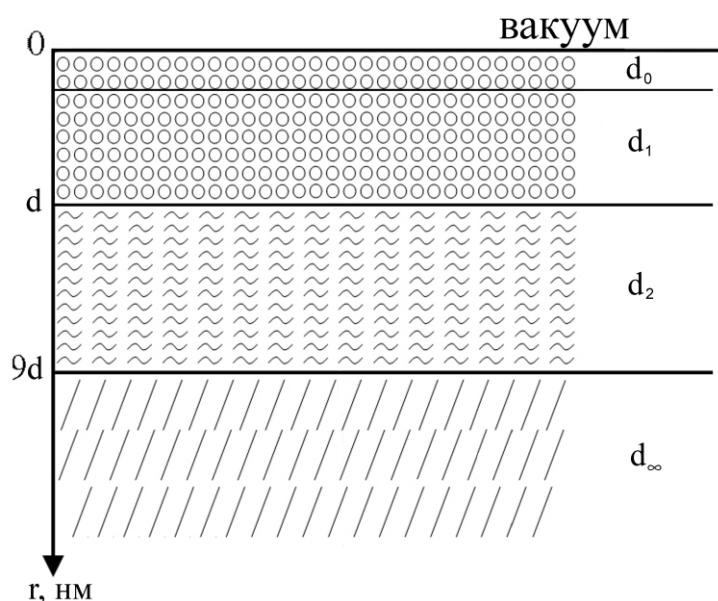


Рисунок 1 - Схематическое изображение многоуровневой модели поверхностного слоя

Для определения толщины поверхностного слоя различных соединений нами использовалась размерная зависимость физического свойства $A(r)$.

Слой $d_1 = d(I)$ описывается зависимостью:

$$A(r) = A_0 \cdot \left(1 - \frac{d}{d+r}\right), d_0 \leq r \leq d. \quad (1)$$

В слое $d(I)$ с атомами чистых металлов происходит реконструкция и релаксация, связанная с перестройкой поверхности [12]. Для золота постоянная решетки равна $a=0,41$ нм и поверхность перестраивается на расстоянии ($d(I)_{Au}=1,2/0,41 \approx 3$) трех атомных монослоев. Размерные эффекты в слое $d(I)$ определяются всем коллективом атомов в системе (коллективные процессы). Такие «квазиклассические» размерные эффекты наблюдаются только в наночастицах и наноструктурах [13].

Слой $d_2=d(II)$ описывается зависимостью:

$$A(r) = A_0 \cdot \left(1 - \frac{d}{r}\right), r \gg d. \quad (2)$$

Параметр d связан с поверхностным натяжением σ формулой:

$$d = \frac{2\sigma v}{RT}, \quad (3)$$

Здесь σ – поверхностное натяжение массивного образца; v – объем одного моля; R – газовая постоянная; T – температура. В работе [8], а также [14], показано, что с точностью до 3% выполняется:

$$\sigma = 0.7 \cdot 10^{-3} \cdot T_m. \quad (4)$$

где T_m – температура плавления твердого тела (К). Соотношение выполняется для всех металлов и

для других кристаллических соединений. При $T = T_m$ получим:

$$d(I) = 0.17 \cdot 10^{-9} v. \quad (5)$$

Уравнение (5) показывает, что толщина поверхностного слоя $d_1 = d(I)$ определяется одним фундаментальным параметром – молярным (атомным) объемом элемента ($v = M/\rho$, M – молярная масса (г/моль), ρ – плотность (г/см³)), который периодически изменяется в соответствии с таблицей Д.И. Менделеева. Слой $d_2=d(II)$ простирается примерно до размера $d(II) \approx 10d = d_\infty$ где начинается объемная фаза. С этого размера начинаются размерные свойства.

Ряд исследователей высказывает мнение, что верхний предел (максимальный размер элементов) для наноструктур должен быть связан с неким критическим характерным параметром: длиной свободного пробега носителей в явлениях переноса, размерами доменов/доменных стенок, диаметром петли Франка-Рида для скольжения дислокаций и т.п. [15]. Значит в слое $d(II)$ должно быть много размерных эффектов, связанных с оптикой, магнетизмом и другими свойствами согласно уравнению 2.

Атомарно-гладкие металлы

В табл. 1 приведена толщина поверхностного слоя d – металлов, приведенная около температуры плавления (за исключением атомов 7-го периода), рассчитанная по уравнению (5). Все размеры $d(I)$ имеют значения около 2 нм (исключая иттрий и скандий). Толщина поверхностного слоя для золота, определенная методом скользящих рентгеновских лучей оказалась равной 1,2 нм [16]. С учетом коэффициента теплового расширения золота эта величина совпадает с табл. 1.

Таблица 1

Толщина поверхностного слоя d – металлов

Me	$d(I)$, нм	Me	$d(I)$, нм	Me	$d(I)$, нм	Me	$d(I)$, нм
Sc	2,6	Ta	1,8	Fe	1,2	Pd	1,5
Y	3,4	Cr	1,2	Ru	1,4	Pt	1,6
Ti	1,7	Mo	1,6	Os	1,4	Cu	1,6
Zr	2,2	W	1,6	Co	0,7	Ag	1,7
Hf	2,3	Mn	1,3	Rh	1,4	Au	1,8
V	1,7	Tc	1,4	Ir	1,4	Zn	2,0
Nb	1,8	Re	1,3	Ni	1,1	Cd	2,2

В табл. 2 толщина слоя $d(I)$ приведена для лантаноидов.

Здесь наблюдаются значения от 4 до 5,5 нм, что в два раза больше толщин слоя для d -элементов.

Именно поэтому f – элементы не образуют высокоэнтропийных сплавов.

Таблица 2

Толщина поверхностного слоя $d(I)$ лантаноидов

Me	$d(I)$, нм	Me	$d(I)$, нм	Me	$d(I)$, нм
Ce	3.8	Eu	5.8	Er	5.5
Pr	4.2	Gd	5.3	Tm	5.2
Nd	4.5	Tb	5.3	Yb	4.6
Pm	4.4	Dy	5.3	Lu	5.7
Sm	4.4	Ho	5.5	-	-

Прямой и обратный эффект Холла-Петча

В поликристаллических металлах влияние среднего размера зерна d на величину предела текучести σ_T принято описывать с помощью соотношения Холла-Петча [17, 18]:

$$\sigma_T = \sigma_0 + K \cdot d^{-1/2}, \quad (6)$$

где σ_0 – напряжение, характеризующее сопротивление пластической деформации со стороны кристаллической решетки и дефектов решетки, препятствующих движению решеточных дислокаций; K – коэффициент, характеризующий вклад в упрочнение со стороны границ зерен.

В работе [19] для предела текучести атомарно-гладких нанокристаллов нами получено:

$$\sigma_T = \sigma_0 + C \cdot \sigma \cdot d^{-1/2}. \quad (7)$$

Уравнение (7) по форме совпадает с уравнением Холла – Петча (6). Однако коэффициенты пропорциональности в обеих формулах различаются. В рассматриваемом случае поведение предела текучести малых частиц определяется также величиной их поверхностного натяжения σ по формуле (3). Для малых d Русанов получил асимптотическую линейную зависимость [20]:

$$\sigma = K \cdot d. \quad (8)$$

Здесь K – коэффициент пропорциональности. Формула (8) получена на основе термодинамического рассмотрения и должна быть применима к малым объектам различной природы.

В этом случае уравнение (7) принимает вид:

$$\sigma_T = \sigma_0 + C \cdot K \cdot d^{1/2}. \quad (9)$$

Уравнение (9) представляет собой обратный эффект Холла – Петча.

Выводы и дальнейшие перспективы исследований.

Таким образом, обратный эффект Холла – Петча обусловлен размерной зависимостью поверхностного натяжения наночастиц и наноструктур, которая определяется формулой Русанова (8). Поскольку C и K являются константами, то $\sigma_T - \sigma_0$ линейно зависит от поверхностного натяжения σ , и в конце концов от атомного радиуса r в соответствие с формулой (5).

Дальнейшие перспективы исследований связаны с толщиной поверхностного слоя не только атомарно-гладких металлов, но и аморфных твердых тел, стекол и полимеров, минералов и т.д. Это связано с тем фактом, что в рамках предложенной модели поверхностный слой $d(I)$ представляет собой наноструктуру и определяется одним фундаментальным параметром – атомным объемом твердого тела.

Литература

1. Мальгин Г.А. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов. // ФТТ, 2007, Т.49, вып. 6. – С. 961-983.
2. Козлов Э.В., Жданов А.Н., Конева Н.А. Барьерное торможение дислокаций. Проблема Холла–Петча. // Физическая мезомеханика, 2006, Т.9, №3. – С. 81-92.
3. Козлов Э.В., Жданов А.Н., Конева Н.А. Механизмы деформации и механические свойства наноматериалов. // Физическая мезомеханика, 2007, Т.10, №3. – С. 95-103.
4. Козлов Э.В., Конева Н.А., Попова Н.А. Зеренная структура, геометрически необходимые дислокации и частицы вторых фаз в поликристаллах микро- и мезоуровня. // Физическая мезомеханика, 2009, Т.12, №4. - С. – 93-106.
5. Зуев Л.Б., Зариковская Н.В., Федосова М.А. Макролокализация пластического течения в алюминии и соотношение Холла–Петча. // Журнал технической физики, 2010, том 80, вып. 9. – 68-74.
6. Нохрин А.В., Чувильдеев В.Н., Копылов В.И., Лопатин Ю.Г., Пирожникова О.Э., Сахаров Н.В., Пискунов А.В., Козлова Н.А. Соотношение Холла–Петча в нано-и микрокристаллических металлах, полученных методами интенсивного пластического деформирования. // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2010, № 5(2). - С. 142–146.
7. Панин В.Е., Моисеенко Д.Д., Елсукова Т.Ф. Многоуровневая модель деформируемого поликристалла. Проблема Холла-Петча // Физическая мезомеханика, 2013, Т. 16, № 4. – С. 15–28.
8. Юров В.М. Толщина поверхностного слоя атомарно-гладких кристаллов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. - Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019 Вып. 11. - С. 389-397.
9. Юров В.М., Лауринас В.Ч., Гученко С.А. Толщина поверхностного слоя атомарно-гладких магнитных наноструктур // Нано- и микросистемная техника, 2019, №6. – С. 347-352.
10. Панин В.Е., Гриняев Ю.В. Физическая мезомеханика - новая парадигма на стыке физики и механики деформируемого твердого тела // Физическая мезомеханика, 2003, Т.6, №4. – С. 9-36.
11. Арутюнов К.Ю. Квантовые размерные эффекты в металлических наноструктурах // ДАН ВШ РАН. 2015. №3(28). – С. 7-16.
12. Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. - М.: Наука. 2006. - 490 с.
13. Уваров Н.Ф., Болдырев В.В. Размерные эффекты в химии гетерогенных систем // Успехи химии. 2001. Т. 70 (4). – С. 307-329.
14. Рехвиашвили С.Ш., Кишტიкова Е.В., Кармокова Р.Ю. К расчету постоянной Толмена // Письма в ЖТФ, 2007, Т. 33, вып. 2. – С. 1-7.
15. Андриевский Р.А., Глезер А.М. Размерные эффекты в нанокристаллических материалах. I.

Особенности структуры. Термодинамика. Фазовые равновесия. Кинетические явления. // Физика металлов и металловедение. 1999. Т. 88. № 1. - С. 50-73.

16. Guo J. X-Rays in Nanoscience: Spectroscopy, Spectromicroscopy, and Scattering Techniques. - Wiley-Vch. Verlag. 2010. - 263 p.

17. Hall E.O. The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results. // Proc. Phys. Soc., 1951, V. 64B. - P. 747-753.

18. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystals. //J. Iron. Steel. Inst., 1953, V. 174. - P. 25-28.

19. Юров В.М., Лауринас В.Ч., Гученко С.А. Некоторые вопросы физики прочности металлических наноструктур // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – Тверь: Твер. гос. ун-т., 2013, Вып. 5. – С. 408–412.

20. Русанов А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. – Л.: Химия, 1967. – 346 с.