

01;05;12

Возможные проявления квантовых эффектов в кинетике микроиндентирования бора

© А.И. Слущер, В.И. Бетехтин, А.Г. Кадомцев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: Alexander.Slutsker@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 16 марта 2010 г.)

Проведено теоретическое рассмотрение кинетики индентирования твердого тела — зависимости глубины внедрения индентера от времени, силы и температуры с учетом квантовых эффектов в атомной динамике твердых тел. Проведены экспериментальные исследования температурной зависимости микротвердости бора, показавшие качественное и количественное согласие с расчетными зависимостями. Сделано заключение о возможном проявлении квантовых (туннельных) эффектов в кинетике микроиндентирования бора.

Введение

Для основных механических процессов при нагружении твердых тел — деформирования (упругого и пластического) и разрушения — установлено или еще определяется влияние квантовых особенностей атомной динамики. Так, при упругом нагружении в области низких температур (от нуля до $T \approx 0.3\theta$, где θ — дебаевская, характеристическая, температура) имеет место нелинейная зависимость модуля упругости E от температуры с уменьшением наклона $E(T)$ до нуля при $T \rightarrow 0$ [1]. Такая нелинейность обусловлена нелинейностью температурной зависимости средней тепловой энергии атомов, вызванной квантованием (дискретностью) колебательной энергии атомов, при ангармоничности межатомного взаимодействия.

Для таких процессов, как пластическое деформирование и разрушение, отмечаются случаи, когда экспоненциальные температурные (при высокой температуре) зависимости скорости деформирования и долговечности переходят в „атермическое плато“ при низкой температуре [2,3]. Здесь сделаны предположения о действии другого квантового эффекта — туннелирования атомов сквозь потенциальные барьеры элементарных актов этих процессов, снижаемые приложенным напряжением [2,3].

Таким образом, разработка интересного физического вопроса о роли квантовой динамики атомов в механических процессах для нагруженных тел при низкой температуре уже началась и дала результаты, позволяющие предполагать реальность квантовых эффектов в этих процессах.

Для твердых тел наряду с такими механическими характеристиками, как прочность и деформируемость, имеется и широко используется такая характеристика, как „твердость“ или „микротвердость“ [4]. Эта характеристика измеряется методом индентирования (или микроиндентирования). Под действием вдавливающей нагрузки — силы P — производится внедрение индентера. Распространенность получили инденторы Виккерса [4], имеющие форму острия в виде четырехгранной

пирамиды с углом между противоположными гранями $\alpha = 136^\circ$.

Характеристиками индентирования являются следующие величины: заглубление индентера h и размеры квадратного отпечатка: диагональ квадрата d или сторона квадрата a . Величина h связана с d и a : $h = 0.5a \operatorname{ctg} 68^\circ \approx 0.2a \approx 0.14d$. Твердостью H_v принято называть отношение силы P к площади граней призматического отпечатка

$$S = \frac{d^2}{2 \sin \frac{\alpha}{2}} = \frac{d^2}{1.854} = 1.08a^2,$$

$$H_v = \frac{P}{S} = 1.854 \frac{P}{d^2} = 1.08 \frac{P}{a^2} \cong 4 \cdot 10^{-2} \frac{P}{h^2}.$$

Таким образом, твердость имеет размерность и смысл напряжения, действующего под индентером, характеризующего сопротивление материала внедрению индентера.

Разумеется, внедрение индентера является сложным процессом, в котором присутствуют и упругая, и пластическая (проявляющаяся в „выдавливании“ материала из-под индентера с образованием „вывала“ по контуру отпечатка) деформации, и разрушение материала (образование трещин и измельчение материала в зоне около острия).

Чтобы исключить упругую составляющую внедрения обычно фиксируют и измеряют размер отпечатка после съема индентера с образца, т.е. остаточную необратимую составляющую индентирования. Тогда твердость приобретает смысл комбинированной прочностной характеристики, включающей разрывную прочность и пластичность.

Кинетический характер индентирования отмечался давно. Было видно, что при постоянной силе P происходит постепенное заглубление индентера (возрастание h) со временем. Следовательно, и величина, называемая твердостью (при постоянной силе P), не остается постоянной, а со временем уменьшается, поскольку $H_v = 4 \cdot 10^{-2}(P/h^2)$. Поэтому всегда, когда приводятся

значения твердости, указывается время действия индентера (как правило, $t = 5-15$ s).

При весьма наглядной кинетичности использование кинетики индентирования для физического анализа процесса индентирования и характеристик тела осуществлялось слабо. Отметим, что анализ кинетики пластического деформирования и разрушения развит весьма основательно и дает богатую информацию по элементарным актам механических процессов: исходные барьеры, активационные объемы, локальные напряжения, механизм преодоления барьера [5].

Поэтому представляется несомненным интерес к использованию кинетики и индентирования для получения физической информации о процессах, происходящих под индентером. Пока имеются лишь считанные работы по такому направлению [6,7], но они не содержат должной детализации анализа кинетики индентирования.

В задачу настоящей работы входят и разработка кинетического анализа индентирования, и рассмотрение индентирования такого материала, как бор, с целью выявления возможности проявления квантовых эффектов в индентировании.

Поскольку при индентировании такого „жесткого“ вещества, как бор, заглубление индентера и размеры отпечатка составляют единицы-десятки микрометров, то в дальнейшем будем пользоваться термином „микроиндентирование“.

1. Кинетический анализ микроиндентирования

Целью анализа является получение соотношений между измеряемым значением микротвердости (H_v) и характеристиками элементарных актов процесса внедрения индентера в материал. Конкретной задачей является установление аналитической связи микротвердости со временем индентирования (t) и с температурой тела (T), т.е. функции $H_v(t, T)$.

Основной величиной в кинетическом анализе микроиндентирования выступает скорость заглубления индентера $\dot{h} = dh/dt$.

Поскольку необходимым условием индентирования является „вдавливающая“ сила P , то, очевидно, скорость индентирования должна зависеть от P . Поскольку микротвердость H_v пропорциональна P : $H_v = 4 \cdot 10^{-2}(P/h^2)$, скорость индентирования оказывается зависящей от микротвердости:

$$\dot{h} = \Phi(H_v) = \Phi\left(\frac{P}{h^2}\right). \quad (1)$$

В практике индентирования распространением является поддержание нагружающей силы P постоянной. Отметим, что весьма интересным было бы использование режима индентирования, когда значение твердости H_v оставалось бы постоянным во времени продвижении индентера в глубь тела. Тогда получалась

бы прямая связь скорости индентирования \dot{h} с микротвердостью. Режим $H_v(t) = \text{const}$ может обеспечиваться условием изменения силы P во времени так, чтобы $P(t)/h^2(t) = \text{const}$ и соответственно: $P(t) = \text{const}h^2(t)$. Последнее условие может выполняться установлением обратной связи между нагружающей системой и заглублением индентера и соответствующим автоматическим управлением нагружающей системой. Пока такие устройства распространения не получили, поэтому анализ в настоящей работе ведется исходя из условий $P = \text{const}$.

Тогда имеем $\dot{h} = \Psi(h^2)$, откуда приходим к дифференциальному уравнению $\Psi(h^2)dh = dt$ и его решению в интегральной форме:

$$\int_0^h \Psi(h^2)dh = \int_0^t dt = t. \quad (2)$$

Для решения уравнения (2) требуется аналитический вид функции $\Phi(h^2)$. Для выбора формы зависимости $\Phi(h^2)$ используем имеющиеся экспериментальные данные по кинетике ряда процессов. Так, для роста трещины в нагруженном теле, пластического деформирования, микроиндентирования полимеров в классической области значений температуры была установлена единообразная зависимость скорости этих процессов V_i от напряжения σ_1 и температуры T [5,7-9]:

$$V_i \approx V_0^i \exp\left[-\frac{U_i(\sigma_i)}{k_B T}\right], \quad (3)$$

где $U_i(\sigma_i) \approx U_0^i - \gamma_i \sigma_i$

Характерный „больцмановский“ вид зависимостей (3) свидетельствует о том, что элементарные акты всех типов процессов осуществляются термофлуктуационным преодолением потенциального барьера $U_i(\sigma)$, т.е. надбарьерным переходом.

Во всех случаях исходный барьер U_0^i снижается действующим напряжением σ_i (для индентирования $\sigma_1 = H_v$), и характеризующий это снижение коэффициент $\gamma = qV_A$, где V_A — активационный объем элементарного акта, q — коэффициент локальных перенапряжений (концентрации напряжения). Отметим, что величина активационного объема V_A , близка к величине объема атомов V_a [5]; V_0^i — скорость „безбарьерного“ перемещения атомов (когда $U_i(\sigma_i)/k_B T = 0$) близка скорости звука в твердых телах $V_s \approx 10^3-10^4$ м/с [5]; $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К = $8.6 \cdot 10^{-5}$ эВ/К — постоянная Больцмана.

Поскольку продвижение острия индентера в определенной мере подобно росту трещины, а также в связи с уже установленной для индентирования полимеров зависимостью

$$V_{\text{ind}} \approx V_s \exp\left[-\frac{U_{\text{ind}}(H_v)}{k_B T}\right],$$

то можем принять и как общую для индентирования в классической области значений температуры зависимость скорости заглупления индентера в виде:

$$\dot{h} \approx \dot{h}_0 \exp\left(-\frac{U_0 - \gamma H_v}{k_B T}\right), \quad (4)$$

где $\dot{h}_0 \approx 10^3 - 10^4$ м/с.

Правильность выбора такой формы зависимости $\dot{h}(H_v, T)$ будет подтверждена ниже экспериментальными данными.

Подчеркнем теперь, что зависимость $\dot{h}(H_v, T)$ в форме (4) относится к классической области, т.е. к достаточно высоким температурам: $T \geq 0.3\theta$, что для бора отвечает области температуры выше ~ 500 К. В классической области преодоление барьеров $U(H_v) = U_0 - \gamma H_v$ происходит по механизму надбарьерного перехода с использованием флуктуаций тепловой энергии.

При понижении температуры начинает возрастать роль подбарьерного, туннельного механизма преодоления барьера, который в области $T \leq 0.1\theta$ становится доминирующим.

Участие туннельного механизма в преодолении барьера в соответствии с положениями квантовой механики [10,11] приближенно описывается введением в кинетические выражения вместо температуры T произведения $F(T/\Theta)T$, где

$$F\left(\frac{T}{\Theta}\right) = \frac{1}{2} \frac{\Theta}{T} N^{-2} \sum_{n=1}^N n \text{cth}\left(\frac{n}{2N} \frac{\Theta}{T}\right) \quad (5)$$

— функция, учитывающая квантовую динамику атомов, включающую туннелирование [11]; N — число атомов в ребре кристалла. Начиная с $N \approx 20$ функция (5) далее мало меняется до $N \rightarrow \infty$.

График функции $(1/\Theta)F(T/\Theta)T$ представлен на рис. 1. Из вида функции (5) следует:

— при $T \geq \theta$ $F(T/\theta) \rightarrow 1$, что означает переход к классической динамике;

— при $T \rightarrow 0$ $F(T/\theta) \rightarrow (1/4)k_B\Theta$, что означает сохранение колебательной энергии атомов $(1/4)k_B\Theta$ — нулевой энергии и при $T = 0$. Этим самым имеется возможность преодоления барьера путем туннелирования и при $T \rightarrow 0$.

Тогда от зависимости $\dot{h}(T)$ в классической области (4) переходим к обобщенной температурной зависимости, отвечающей и квантовой (низкотемпературной), и классической (высокотемпературной) областям:

$$\dot{h} \approx \dot{h} \exp\left[-\frac{U_0 - \gamma H_v}{k_B T(T/\Theta)}\right] \approx \dot{h} \exp\left[-\frac{U_0}{k_B T F(T/\Theta)}\right] \times \exp\left[\frac{\gamma P \cdot 4 \cdot 10^{-2}}{k_B T F(T/\Theta)} \frac{1}{h^2}\right].$$

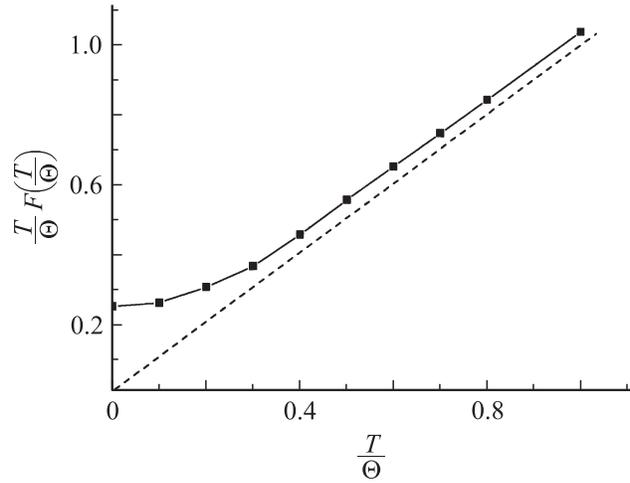


Рис. 1. Температурная функция, учитывающая квантовую динамику.

Введем обозначения:

$$\dot{h} \exp\left[-\frac{U_0}{k_B T F(T/\Theta)}\right] = B,$$

$$4 \cdot 10^{-2} \frac{\gamma P}{k_B T F(T/\Theta)} = b^2,$$

тогда

$$\dot{h} = \frac{dh}{dt} = B \exp\left(\frac{b^2}{h^2}\right),$$

откуда

$$\int_0^h \exp\left(-\frac{b^2}{h^2}\right) dh = B \int_0^t dt = Bt, \quad (6)$$

обозначим $X = h/b$, тогда

$$\int_0^h \exp\left(-\frac{b^2}{h^2}\right) dh = b \int_0^X \exp\left(-\frac{1}{X^2}\right) dX. \quad (7)$$

Фигурирующий здесь интеграл элементарно не берется. Для приближенного значения этого интеграла в зависимости от величины X оценим реальный масштаб значения X . Из результатов индентирования бора следовало характерное значение $h \approx 1\mu\text{m} \approx 10^{-6}\text{m}$ при нагружающей силе $P = 1N$. Поскольку характеристическая температура бора $\theta \sim 1400$ К, а классическая область температуры начинается при $\sim 0.3\theta \sim 500$ К, то для оценки коэффициента b выберем $T F(T/\Theta) \approx T \approx 600$ К.

Значение микротвердости бора при 600 К, как увидим ниже, $H_v \approx 1.8 \cdot 10^{10}$ Па.

Поскольку напряжение индентирования (величина микротвердости) H_v того же масштаба, что и теоретическая прочность бора $\sigma_{th} \approx 4 \cdot 10^{10}$ Па [12], то это означает, что локальные перенапряжения в образцах

индентруемого бора невелики. Поэтому значение коэффициента γ можно считать близким к величине объема атома бора $V_a \approx 10 \text{ \AA}^3 \approx 10^{-2} \text{ м}^3$, тогда

$$b = \left[\frac{4 \cdot 10^{-2} \gamma P}{k_B T F(T/\Theta)} \right]^2 \approx 7 \cdot 10^{-6} \text{ м} \approx 7 \mu\text{м},$$

отсюда $X = h/b \approx 0.15$.

То обстоятельство, что для реальных условий измерения микротвердости бора $X \ll 1$, позволяет получить приближенное выражение для интеграла в (7). Было проведено численное интегрирование выражения (7), которое показало, что для области $\sim 0.1 < X < -0.2$ (такая область отвечает условиям реальных измерений микротвердости) с приемлемым для данной задачи приближением выполняется:

$$\int_0^x \exp\left(-\frac{1}{X^2}\right) dx \approx 10^{-3} \exp\left(-\frac{1}{X^2}\right),$$

тогда получаем приближение уравнения (6):

$$\exp\left(-\frac{b}{h^2}\right) \approx 10^3 \frac{B}{b} t. \quad (8)$$

Прологарифмировав (8), получаем:

$$\frac{b^2}{h^2} \approx -\ln\left(10^3 \frac{B}{b} t\right). \quad (9)$$

Поскольку:

$$b^2 = 4 \cdot 10^{-2} \frac{\gamma P}{k_B T F(T/\Theta)}, \quad B = \hbar_0 \exp\left[-\frac{U_0}{k_B T F(T/\Theta)}\right],$$

$$H_v = 4 \cdot 10^{-2} \frac{P}{h^2},$$

из (9) получаем общее выражение для температурно-временной зависимости микротвердости:

$$H_v(T, t) \approx \frac{U_0}{\gamma} - \frac{k_B}{\gamma} \ln\left\{ 5 \cdot 10^3 \hbar_0 \left[\frac{\gamma P}{k_B T F(T/\Theta)} \right]^{-1/2} t \right\} T F(T/\Theta). \quad (10)$$

Логарифмическая зависимость является слабой, поэтому исходя из характерных значений

$$\gamma \approx 10^{-29} \text{ м}^3, \quad P = 1 \text{ Н}, \quad h \approx 10^4 \text{ м/с}, \quad T F\left(\frac{T}{\Theta}\right) \approx 600 \text{ К}.$$

Величину

$$\ln\left\{ 5 \cdot 10^3 \hbar_0 \left[\frac{\gamma P}{k_B T F(T/\Theta)} \right]^{-1/2} \right\}$$

можно принять постоянной и равной приблизительно ≈ 30 , тогда выражение (10) приобретает менее громоздкий вид:

$$H_v(T, t) \approx \frac{U_0}{\gamma} - \frac{k_B}{\gamma} [30 + \ln t] T F\left(\frac{T}{\Theta}\right). \quad (11)$$

Выражение (11) прямо описывает температурную зависимость микротвердости при заданном времени индентирования t . Вид зависимости $H_v(T)$ при $t = \text{const}$ приведен на рис. 2, а.

При температуре $T \geq 0.3\Theta$ зависимость $H_v(T)$ близка к линейной (классическая зависимость), отвечающей сплошному спектру энергии атомов.

При температуре от нуля до $\sim 0.2\Theta$ зависимость $H_v(T)$ является нелинейной, уменьшая до нуля наклон при $T \rightarrow 0$. Именно эта нелинейность $H_v(T)$ связана с проявлением механизма туннелирования, который при $\frac{T}{\Theta} \approx 0.3-0.1$ „смешивается“ с надбарьерным механизмом (происходит энергетический флуктуационный „заброс“ атома на более высокий уровень энергии, а уже с этого уровня происходит туннелирование сквозь

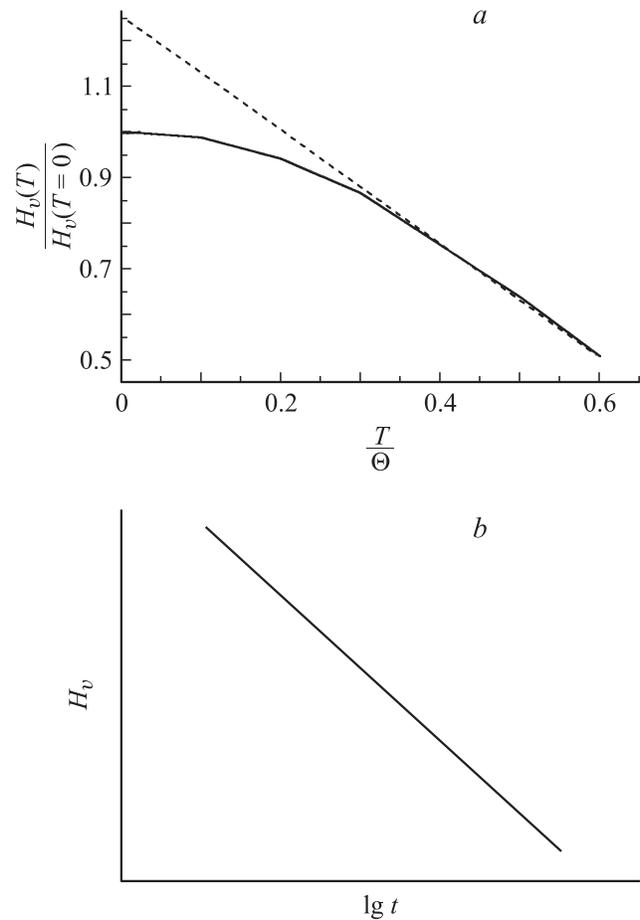


Рис. 2. Расчетные зависимости микротвердости твердого тела: а — температурная зависимость микротвердости при постоянных нагружающей силе и времени индентирования; б — зависимость микротвердости от времени при постоянных нагружающей силе и температуре.

меньшую, чем внизу, ширину барьера), а при $T/\theta < 0.1$ туннельный механизм практически полностью доминирует.

Выражение (11) можно переписать в форму, прямо выражающую зависимость микротвердости от времени t при заданной температуре:

$$H_v(t) \approx -\frac{1}{\gamma} [U_0 - 30k_B T F(T/\Theta)] - \frac{k_B T F(T/\Theta)}{\gamma} \ln t. \quad (12)$$

Вид зависимости $H_v(t)$ при $T = \text{const}$ приведен на рис. 2, *b*. Эта зависимость остается линейной во всей области температуры.

Таким образом, анализ кинетики инdentирования привел к расчетным зависимостям микротвердости от температуры $H_v(T)$ в широкой области значений температуры и зависимости микротвердости от времени инdentирования $H_v(t)$, которая следует зависимости глубины инdentирования $h(t)$ от времени.

Зависимости $H_v(t)$ и $H_v(T)$ измеряются экспериментально и могут быть сравнены с расчетными.

2. Экспериментальное исследование микроинdentирования бора

В качестве объекта исследования бор был выбран потому, что это вещество обладает одной из самых высоких характеристических температур $\theta \approx 1400$ К [12]. Это обстоятельство обуславливает возможность проявления квантовых эффектов не при глубоких низких температурах, а, как видно из рис. 2, *a*, и при достаточно высоких — до $\sim 0.3\theta \approx 500$ К.

Микроинdentирование проводилось алмазной пирамидой Виккерса. Пластины из бора тщательно полировались. Измерения проводились в диапазоне времени до $3 \cdot 10^3$ с и в диапазоне температуры 293–1173 К.

Измерялись диагонали отпечатков после подъема инdentера. Сила вдавливания инdentера составляла $P = 1.02N$. Размеры отпечатков надежно регистрировались от $\sim 7 \mu\text{m}$, что отвечало заглублениям инdentера от $\sim 1 \mu\text{m}$.

2.1. Установление кинетического характера микроинdentирования бора

Измерения зависимости микротвердости от времени инdentирования были проведены при температуре 623 К (которая для бора может считаться относящейся к классической области). Измерения проводились после каждого задаваемого времени выдержки инdentера под действием постоянной силы $P = 1.02N$ в диапазоне $10-3 \cdot 10^3$ с.

Результаты измерения значения микротвердости при заглублении инdentера со временем в условиях действия постоянной силы представлены на рис. 3. Показана

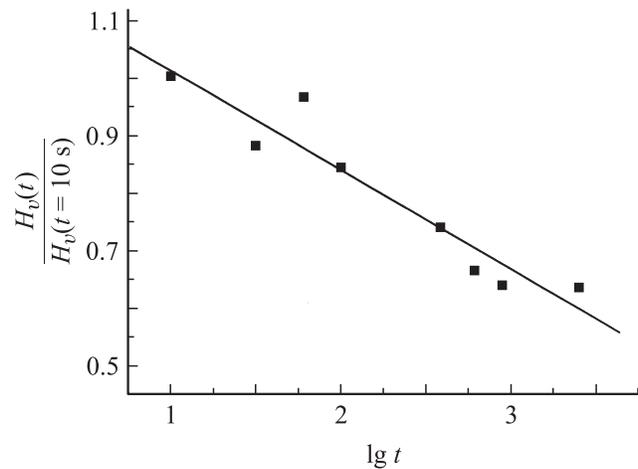


Рис. 3. Зависимость микротвердости бора от времени при постоянных нагружающей силе (1.02N) и температуре (623 К).

зависимость относительной микротвердости, отнесенной к значению микротвердости при времени инdentирования 10 с:

$$\frac{H_v(t)}{H_v(t=10\text{ s})},$$

в логарифмических координатах по времени. Из рис. 3 видно, что снижение микротвердости в зависимости от $\lg t$ имеет линейный характер. Это согласуется с линейностью по $\ln t$ расчетной зависимости $H_v(t)$ — выражение (12) и рис. 2, *b*.

Наклон зависимости ~ -0.15 , что лежит в области значений $\Delta H_v / \Delta \lg t$, при характерных значениях входящих в (12) параметров для бора.

Таким образом, согласие экспериментальной зависимости $H_v(t)$ с расчетной утверждает кинетический характер микроинdentирования бора, и можно считать, что выражение (12) достаточно хорошо описывает кинетику микроинdentирования.

2.2. Температурная зависимость микротвердости бора

Измерения зависимости $H_v(T)$ были произведены в диапазоне 293–1173 К при постоянной силе на инdentере $P = 1.02N$ и постоянном времени инdentирования 10 с.

Полученная экспериментальная зависимость микротвердости бора от температуры представлена на рис. 4. Как видно, форма этой зависимости: линейная часть при высокой температуре ($\sim 600-1200$ К) и криволинейная часть с уменьшением наклона при понижении температуры ($\sim 600-300$ К) совпадает с формой расчетной зависимости $H_v(T)$ (рис. 2, *a*), в которой учитывались квантовые эффекты — участие туннельного механизма преодоления барьера в элементарных актах процесса инdentирования. Именно эти эффекты и приводили расчетную зависимость $H_v(T)$ к нелинейности при понижении температуры.

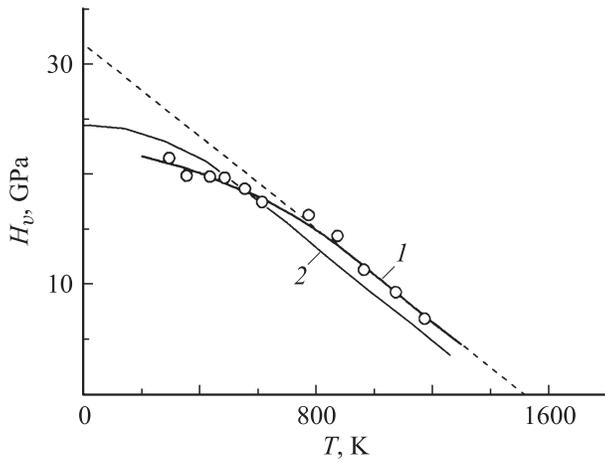


Рис. 4. Зависимость микротвердости бора от температуры при постоянных нагружающей силе (1.02N) и времени индентирования (10 с): 1 — экспериментальные данные; 2 — расчет с учетом квантовых эффектов (туннелирования).

Таким образом, характерная форма экспериментальной зависимости $H_v(T)$ дает качественное указание на возможность реального и существенного участия туннельного механизма в индентировании бора при низких температурах.

Проведение количественный анализ экспериментальной зависимости $H_v(T)$, используя расчетное выражение (11) и известное значение характеристической (дебаевской) температуры бора $\theta = 1400$ К.

Высокотемпературная часть зависимости $H_v(T)$: при $T > 600$ К, т.е. при температуре выше $\sim 0.3\theta$ лежит в классической области для бора, является линейной и поэтому описывается выражением (11) при $F(T/\Theta) \approx 1$.

Тогда, линейно экстраполируя высокотемпературную часть $H_v(T)$ к $H_v = 0$, находим „температуру нулевой микротвердости“ $T_{H_v=0} \approx 1.52 \cdot 10^3$ К (рис. 4). Из выражения (11) получаем значение исходного барьера $U_0 \approx k_B \cdot 32.3 T_{H_v=0} \approx 6.8 \cdot 10^{-19}$ Дж ≈ 4.3 эВ.

Энергия сублимации бора (т.е. энергия разрыва половины числа связей атома бора в координационной сфере) составляет $W_s \sim 5.6$ эВ [1]. Значение $U_0 \approx 0.8W_s$ указывает на участие разрывов межатомных связей в элементарных актах микроиндентирования бора. Наклон линейной части $H_v(T)$ составляет $\Delta H/\Delta T = -2.1 \cdot 10^7$ Па \cdot К $^{-1}$.

Из выражения (11) следует:

$$\gamma = -k_B \cdot 32.3 \left(\frac{\Delta H}{\Delta T} \right)^{-1} \approx 2.1 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3 \approx 2.1 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^3.$$

Выше уже отмечалось, что активационный объем элементарных актов перегруппировки атомов близок к объему атома. Объем атома бора $\sim 10^{-2}$ нм 3 . Коэффициент γ в кинетике микроиндентирования бора оказался близким к объему атома бора. Это означает, что выражение (11) правильно описывает кинетику

микроиндентирования бора в классических условиях, как процесс, состоящий из элементарных актов перегруппировки атомов (с участием разрывов межатомных связей), в которых барьер снижается напряжением под индентером, равным значению микротвердости, и локальные напряжения мало отличаются от микротвердости. Таким образом, значительных локальных перенапряжений при индентировании бора не возникает, в отличие от разрушения образцов бора действием одноосного растягивающего напряжения [14].

Следующую линейную экстраполяцию высокотемпературной части зависимости $H_v(T)$ делаем к ординате при $T = 0$ и получаем значение $H_v(0) = U_0/\gamma \approx 32$ ГПа.

При разрывах межатомных связей преодолевается теоретическая прочность связей σ_{th} , которая определяется барьером акта разрыва W_0 и активационным объемом: $\sigma_{th} \approx W_0/V_A$ [12].

Поскольку коэффициент γ близок к V_A бора, то экстраполяционное значение $H_v(0)$ имеет смысл теоретической прочностной характеристики сопротивления бора индентированию. И действительно, значение $H_v(0) \approx 32$ ГПа оказывается недалеким от теоретической разрывной прочности бора: ~ 40 ГПа [12].

Таким образом, анализ кинетики микроиндентирования бора в классической (высокотемпературной) области дал количественные параметры процесса микроиндентирования: величину барьера, активационного объема, „теоретической твердости“. Этим определялись элементарные акты микроиндентирования бора, как перегруппировки атомов бора с участием разрывов межатомных связей, происходящие надбарьерными переходами за счет локальных флуктуаций тепловой энергии.

Обратимся теперь к низкотемпературной части экспериментальной зависимости $H_v(T)$.

Отметив выше качественное, функциональное сходство экспериментальной зависимости и расчетно-теоретической, учитывающей квантовую динамику (туннелирование), выясним степень количественного соответствия экспериментальных данных теоретическим положениям.

Характеристическая (дебаевская) температура бора $\theta = 1400$ К. По выражению (5) находим функцию $TF(T/\Theta)$ для бора, а затем, пользуясь установленными при анализе высокотемпературной части $H_v(T)$ значениями: $U_0 \approx 6.8 \cdot 10^{-19}$ Дж и $\gamma \approx 2.1 \cdot 10^{-29}$ м 3 , получаем по выражению (11) расчетную температурную зависимость $H_v(T)$. График расчетной зависимости $H_v(T)$ приведен на рис. 4 в сопоставлении с экспериментальной зависимостью. Можно видеть, что обладающие характерной криволинейностью расчетная и экспериментальная температурные зависимости удовлетворительно согласуются друг с другом. Поскольку криволинейность расчетной зависимости $H_v(T)$ вызвана включением туннельного механизма микроиндентирования, то согласие результатов эксперимента и расчетов является основанием для предположения о реальности участия квантового туннельного механизма в индентировании бора.

Судя по характеру приближения зависимости $H_v(T)$ к $T = 0$ можно заключить, что в области $T < \sim 200$ К туннельный механизм оказывается не просто соучастником наряду с термофлуктуационным всплеском энергии в элементарном акте, а является доминирующим.

Разумеется, представление о том, что в таком макроскопическом „грубом“ процессе, как индентирование, проявляется один из самых сложных и интересных квантовых эффектов — туннелирование атомов, требует дальнейшей проверки и разработки. Здесь желательны измерения микротвердости в кинетическом режиме — заглупление индентера со временем при низких температурах. Данные по температурной зависимости скорости процесса индентирования при низких температурах позволили бы более уверенно судить о реальности туннельного механизма в этом процессе.

Пока можно отметить, что такие же характерные нелинейности температурных зависимостей зарегистрированы для кинетики разрушения бора и других твердых тел с высокими характеристическими температурами, позволившие и для элементарных актов разрушения — разрывов напряженных межатомных связей — предполагать участие механизма туннелирования [3,14].

Работа выполнена при финансовой поддержке программы президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“ (проект 10.20).

Список литературы

- [1] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1982. 280 с.
- [2] Каганов М.И., Кравченко В.Я., Нацик В.Д. // УФН. 1973. Т. 111. № 6. С. 655–683.
- [3] Салганик Р.Л., Слуцкер А.И., Айдаров Х. // ДАН. 1984. Т. 274. № 6. С. 1362–1366.
- [4] Шапошиников Н.А. Механические испытания металлов М.–Л.: Машгиз, 1951. 384 с.
- [5] Регель В.Р., Слуцкер А.И., Томашевский Э.Е. Кинетическая природа прочности твердых тел. М.: Наука, 1974. 560 с.
- [6] Бессонов М.И., Кувшинский Е.В. // Зав. лаборатория. 1962. Т. 28. С. 504–508.
- [7] Кац М.С., Регель В.Р., Санфирова Т.П., Слуцкер А.И. // Механика полимеров. 1973. № 1. С. 22–27.
- [8] Регель В.Р., Лексовский А.М. // ФТТ. 1970. Т. 12. Вып. 11. С. 3270–3276.
- [9] Sherby O.D., Dorn J.E. // Proc. Soc. Explt. Stress. Analysis. 1954. Vol. 12. P. 139–147.
- [10] Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука. 1967. 442 с.
- [11] Салганик Р.Л. // ФТТ. 1970. Т. 12. Вып. 5. С. 1336–1344.
- [12] Слуцкер А.И. // Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого твердого тела. СПб: Изд-во СПГУ, 2004. Вып. 8. С. 191–1210.
- [13] Физические величины: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
- [14] Слуцкер А.И., Айдаров Х. // ФТТ. 1983. Т. 25. Вып. 3. С. 777–783.