

PACS numbers: 34.20.Cf, 46.50.+a, 61.72.Bb, 61.72.J-, 61.72.Lk, 61.72.Qq, 62.20.mt

Концентратори напружень в атомарному моделю будови металічних матеріалів. 1. Загальні принципи побудови моделю концентраторів напружень в атомарних ґратницях металів

П. Ю. Волосевич

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

На основі вперше запропонованого моделю стосовно виникнення, будови, взаємодії та трансформації трьох видів концентраторів напружень (K), кожний з яких (на масштабних рівнях структурної й атомарної будови металевих матеріалів) представлено двома різними типами вилучення (K^-) та втілення (K^+) маси, розглянуто їхню роль у формуванні процесів втрати механічної стійкості зразків. До першого виду віднесено нестандартні ($Kn^\pm$), які завжди присутні у реальних зразках. До другого та третього видів належать K , які зароджуються за навантажень вздовж базових атомарних ланцюжків з найбільш щільним розташуванням атомів кристалічних ґратниць ($Kse^\pm$), міжатомові віддалі яких стискаються і розтягуються, а також меж зерен ($Kmz^\pm$) і комірок ($Kmk^\pm$). Вперше продемонстровано роль означених первинних стандартних елементарних $Kse^\pm$ у формуванні угруповань комплексних стандартних елементарних внутрішніх ($Kkse^\pm$), поява яких на внутрішніх поверхнях порожнин у вигляді Kn^- або бічних поверхнях зразків завжди супроводжується утворенням нових вершин комплексних стандартних елементарних мікроскопічних поверхневих $Kksemp^-$. Їхні угруповання, розташовані вздовж периметрів

Corresponding author: Pavlo Yuriyovych Volosevych
E-mail: volosp@imp.kiev.ua

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, NAS of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv*

Citation: P. Yu. Volosevych, Stress Concentrators within the Atomic Model of the Structure of Metallic Materials. 1. General Principles of Constructing a Model of Stress Concentrators in the Atomic Lattices of Metals, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 47, No. 11: 1215–1237 (2025). DOI: [10.15407/mfint.47.11.1215](https://doi.org/10.15407/mfint.47.11.1215)

© Publisher PH ‘Akademperiodyka’ of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

площин втрати зразками механічних стійкостей, формують вершини комплексних стандартних поверхневих макроскопічних $K_{ксп}^-$, які на загалі представляють шийки. Вони мають природне походження та фактично є аналогами штучних K^- , які використовуються в механіці. Вперше продемонстровано зв'язки між K різних видів і те, що поява K_H^+ з несиметричними системами їхнього розміщення по поверхнях й об'ємах робочих частин зразків (як в моно-, так і полікристалічних станах) супроводжується відповідними порушеннями симетрії в схемах розподілу напружень розтягу та стискання по вершинах K усіх видів і масштабних рівнів. Внаслідок цього відбувається фрагментація зразків і відхил у розміщеннях траєкторій втрати їхніх механічних стійкостей від положень їхніх серединних по довжині перетинів, які реалізуються за відсутності K_H у станах з досконалими кристалічними будовами. Запропонований модель добре узгоджується з експериментальними та теоретичними результатами, одержаними як на моно-, так і полікристалічних станах різних металів та їхніх стопів. Продемонстровано здатність його прогнозувати шляхи розвитку процесів за пластичних і крихких релаксацій за будь-яких схем випробувань і швидкостей навантажень.

Ключові слова: концентратори напружень, атомарна будова, міжатомова взаємодія, моно- та полікристали, швидкості деформації, механізми релаксації, руйнування, механічні властивості.

Based on the firstly proposed model for the origin, structure, interaction and transformation of three types of stress concentrators (K), each of which is represented by the extraction concentrators (K^-) and the interstitial ones (K^+) at the scale levels of microscopic and atomic structure of samples of metallic materials, the loss of the corresponding mechanical stability is considered under the influence of these stress concentrators. The stress concentrators of the first type include the non-standard concentrators (K_H^+), which are always present in real samples. The stress concentrators of the second and third types are generated by loads along the atomic chains of the crystal lattices (K_{ce}^+) and grain boundaries (K_{mz}^+) or cells (K_{mk}^+). The role of the sets of these primary concentrators (K_{ce}^+) in the formation of the groups of complex standard elementary internal concentrators ($K_{ксев}$) is demonstrated, and the appearance of the K_H^- on the inner surfaces of pores (cracks) or side surfaces of the samples is shown to be always accompanied by the formation of the vertices of complex standard elementary microscopic surface concentrators ($K_{ксемп}^-$). The sets of $K_{ксемп}^-$ in the vicinity of the perimeters of the planes of the mechanical stability loss of samples form the vertices of complex standard surface macroscopic concentrators ($K_{ксп}^-$). The $K_{ксп}^-$ concentrators generally represent the necks, which are the macroscopic extraction concentrators of natural origin and analogous to artificial concentrators K^- considered in mechanics. The interrelation between the concentrators K of different types is demonstrated for the first time. Additionally, the fact of the appearance of non-standard concentrators (K_H^+) with asymmetric systems of their location on the surfaces and in the core of the sample gauge in both single- and polycrystalline states is shown to be accompanied by corresponding violations in the field-distribution symmetry of tensile/compressive stresses occurred on the vertices of standard elementary concentrators K of all types

and scale levels. As a result, there are the sample fragmentation and the deviations in the location of the trajectories' loss of the mechanical stability of their gauges from the positions of their middle axial sections, which are realized in the absence of K_n in the states with ideal crystal structures. The proposed ideas regarding the concentrators are in good agreement with the experimental and theoretical results obtained for both single- and polycrystalline states of various metals and their alloys. The model is able to predict the development of both plastic and brittle relaxation processes under any test schemes and loading rates.

Key words: stress concentrators, atomic structure, interatomic interaction, single- and polycrystalline states, deformation rates, plastic and brittle relaxation mechanisms, mechanical properties.

(Отримано 16 лютого 2023 р.; остаточн. варіант — 12 серпня 2025 р.)

1. ВСТУП

На сьогодні стало очевидним, що подальший розвиток уявлень про концентратори напружень (K), особливості їхнього утворення та поведінки на атомарному рівні будови кристалічних ґратниць лежить в основі розуміння їхньої ролі в процесах формування механічних і службових характеристик не тільки зразків, а й різноманітних вузлів і конструкцій з металевих матеріалів за умов випробувань та експлуатації. У першу чергу, стан проблеми пов'язаний з переходом обґрунтування змін означених характеристик від моделю ізотропного тіла до моделю його атомарної будови.

У першому випадку (у сучасній механіці твердого тіла) майже усі проблеми прогнозування поведінки механічних і службових характеристик виробів вирішуються шляхом розрахунку напруження руйнування, яке виникає у вершині штучного поверхневого концентратора типу вилучення маси (K^-). Його небезпека пов'язується з розмірними параметрами K^- і гостротою вершини [1].

Металофізика розглядає вказані проблеми з огляду на атомарну будову матеріалів, в межах якої набули сенсу та практичного підтвердження існування в реальних металевих виробках значного різноманіття K напружень різних типів (у тому числі й випадкових). Усі вони зароджуються, існують, трансформуються (дисоціюють, або набувають розвитку) та взаємодіють на усіх масштабних рівнях атомарної, структурної та фазової будови матеріалів, визначаючи механічні та службові характеристики виробів в залежності від умов і швидкостей навантажень [2–5]. Зазначимо, що серед усіх K існують і такі, які добре замасковані, але, як і всі інші (які виявляються в структурі матеріалу у вигляді різних порожнин, неметалічних включень, інших фаз тощо), вони визначають свою присутність тільки за пластичної чи крихкої релаксації завдяки генерації

в околах їхніх вершин відповідних (щодо величин напружень і швидкостей їхнього зростання) кількостей елементарних носіїв деформації у вигляді дефектів втілення та вилучення маси, представлених вакансіями, дислокаціями, порами та крихкими тріщинами деформаційного походження [2–5].

Окрім K^- , в металевих матеріалах існують і K^+ втілення. Водночас, якщо перші виглядають порожнинами, то останні представлені певними об'ємами матеріалу (аж до втілених у кристалічну ґратницю атомів), які знаходяться в стисненому стані завдяки напруженням від зовнішніх або внутрішніх сил міжатомової взаємодії. Очевидно, що природа походження обох видів K на атомарному рівні будови металевих матеріалів може бути пов'язана з порушеннями умов рівноваги сил міжатомової взаємодії внаслідок їхньої суперпозиції з тими, котрі виникають в матеріалі конструкції за умов випробувань або експлуатації. Водночас, особливості існування, утворення та взаємодії K усіх типів, які по-різному можуть бути розташовані в об'ємах реальних виробів на масштабних рівнях їхньої атомарної та структурної будови, на сьогодні не вивчено, хоча їхні вершини є первинними відносно визначення величин і швидкостей зміни напружень розтягу та стискування. Означені параметри напружень не тільки регламентують послідовність реалізації усіх відомих на сьогодні механізмів релаксації та напрямки генерації їхніх елементарних носіїв біля вершин K , а й є відповідальними за орієнтації траєкторій втрати механічної стійкості виробів і рівні їхніх механічних і службових характеристик.

Означене стало приводом написання даної роботи, присвяченої створенню модельних уявлень про будову, зв'язки та взаємодію K , які існують і виникають на різних масштабних рівнях атомарної та структурної будови металевих матеріалів, за встановлення їхньої ролі в формуванні схем розподілу напружень і змін механічних властивостей виробів у межах загальних уявлень про залежність реалізації механізмів пластичних і крихкої релаксацій від швидкості навантаження (змін величини зовнішньої макроскопічної сили, деформації, зростання напружень у вершинах K тощо [2–9]).

2. МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Проблему розглянуто в рамках відомих уявлень про масштабні рівні конструкційних і структурних ієрархій будови виробів з металевих матеріалів у послідовності: мега-, макро-, мезо-, мікромасштабний і атомарний рівень [10]. Мегамасштабний рівень охоплює особливості взаємодії конструкції (зразка) як цілого з середовищем оточення. Габарити окремих її елементів, форма та внутрішній вміст (отвори й ін.) віднесено до макрорівня. Всі можливі з'єднання, які пов'язані, у тому числі, зі змінами властивостей ма-

теріалів, особливостями їхніх структурних і фазових станів, а також наявністю різних K (аж до випадкових) у відповідності до їхніх розмірних параметрів віднесено до мезомасштабного, мікромасштабного й атомарного рівнів будови кристалічних ґратниць. На підґрунті аналізу значного масиву експериментальних даних, котрі стосуються пластичних і крихких релаксацій, проведеної з використанням синергетичного підходу [11, 12], в роботах [2, 4–6, 8, 9] було визначено загальні закономірності та послідовність реалізації процесів пластичних і крихкої релаксацій за участі K та генерованих ними дефектів різних типів. Водночас продемонстровано, що їхні кількості в металевих матеріалах залежать від швидкості зростання прикладеної зовнішньої сили та послідовно змінюються за параболічними залежностями від неї.

Для проведення розрахунків стосовно змін міжатомових віддалей і визначення їхнього впливу на процеси, які відповідають за особливості поведінки не тільки напружень, а й розмірів і форми зразків за умов випробувань на розтяг, було використано параметри кристалічної ОЦК-ґратниці заліза ($a = b = c = 2,8664 \text{ \AA}$ [13]), а також результати досліджень впливу на них особливостей формування структур за деформації та низьких температур у моно- та полікристалічних станах. Оскільки означене добре вивчено, багато разів перевірено й у переважній більшості випадків збігається з особливостями процесів, які відбуваються у ґратницях інших металів та їхніх стопів, це має надавати певної універсальності моделю, який пропонується. На схемах переміщення атомів за навантажень від рівноважних положень вихідного стану до нових місць розташування позначено тільки вузлові атоми, які розташовані на однакових віддальх і поділяють розмірні параметри зразків на відповідну сітку, сторона кожного квадрату якої утримує однакову кількість атомів. Це надає можливість зробити наочними не тільки їхні переміщення у поверхневому та приповерхневих шарах зразка, а й особливості змін (за навантаження розтягом) пружних напружень стискання та розтягу, які діють вздовж поперечних та в обох, протилежно спрямованих від поперечної площини втрати механічної стійкості зразка M_0H_0 , напрямках z відповідно (рис. 1). До означеного слід додати, що кількість площин типу M_0H_0 у запропонованому моделю може змінюватися від однієї до двох, що залежить від умов розподілу навпіл їхньої загальної чисельності (кратна чи ні до двох) за встановлення рівноваги між верхньою та нижньою частинами зразка за розтягу. Але, з огляду на те, що ця обставина принципово не впливає на механізм утворення шийки, проведений в роботі розгляд стосується випадку, коли така площина є одною-єдиною. У розрахунках напружень враховувались особливості розкладу прикладеної зовні сили за міжатомовими віддальми з урахуванням тих обставин, що зміна параметра ОЦК-ґратниці заліза

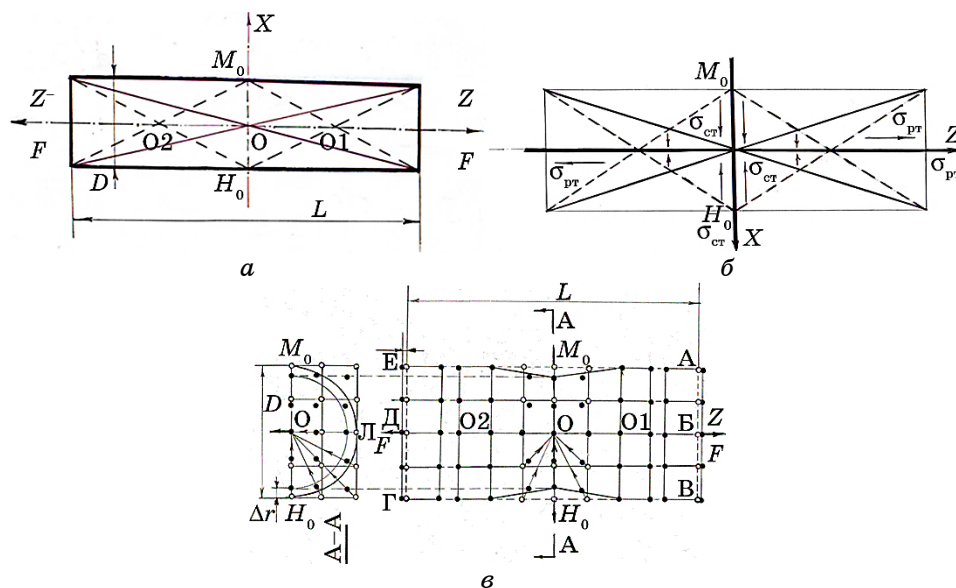


Рис. 1. Схеми робочої частини циліндричного зразка з досконалою будовою кристалічної ґратниці та позначеними розподілами по її об'єму напружень розтягу (σ_{pt}) та стискання (σ_{st}) — суцільні та пунктирні лінії, які перетинаються в центрі O площини M_0H_0 та в її околах в центрах O1 і O2 відповідно (a, б). Напрямки дії напружень розтягу та стискання (б) й відповідне щодо них переміщення атомів з утворенням Кксп⁻ у вигляді шийки (в) позначено стрілками.

Fig. 1. Schemes of working part of cylindrical sample with the ideal crystalline lattice and marked distributions of the tensile (σ_{pt}) and compression (σ_{st}) stresses over its volume (continuous and dotted lines, which cross in a centre O of M_0H_0 plane and in its neighbourhood in the centres of O1 and O2 accordingly (a, б). Location and moving of atoms in a neck along chains with their densest packing before and during tensile testing (в).

за пластичних деформацій в інтервалі напружень від 0 до σ_m не перевищує 3% від його параметра a [13–15].

3. ПРИНЦИПИ ПОБУДОВИ МОДЕЛЮ КОНЦЕНТРАТОРІВ В АТОМАРНИХ ІГРАТНИЦЯХ МЕТАЛІВ

Побудова модельних уявлень про К вимагає мінімізації усього різноманіття їхніх видів [4, 5, 16] на підставі виявлення загальних закономірностей утворення, атомарної будови, розмірів і поведінки за умов різних силових схем випробувань виробів під час визначення їхніх механічних і службових характеристик. У підґрунтя моделю атомарної будови всіх К покладено засади ядерної фізики [17–23] та

експериментальні результати, одержані за спостережень розвитку процесів, які передують і супроводжують пружню та пластичну деформації в інтервалі напружень від 0 до σ_m і за різних видів руйнувань в інтервалах $\sigma_m - \sigma_p$ у механічних випробуваннях.

Згідно з першим, досконалий стан і суцільність кристалічних ґратниць металевих матеріалів забезпечується силами взаємодії між сусідніми атомами. Відповідальність за виникнення цих сил в більшості металів та їхніх стопів покладено на електронні системи атомів, кожна з яких розділена на два види — ферміони та бозони. До ферміонів відносяться електрони стабільних (внутрішніх, базових) оболонок, які сприяють взаємному відштовхуванню сусідніх атомів, у той час як бозони, представлені електронами зовнішніх оболонок, завдяки обмінній взаємодії забезпечують зв'язок між сусідами. Суперпозиція означених сил з прикладеними ззовні сприяє утриманню нелінійних коливних процесів атомів у ґратницях біля певних рівноважних положень, на підставі яких формуються схеми розташування їхніх вузлів. Водночас, віддалі між вузлами (атомами), як і амплітуди й особливості їхніх нелінійних коливань і сил взаємодії в межах існування кожного кристалічного стану, визначаються видами атомів і термодинамічними параметрами за їхніх залежних і незалежних змін. Силовий варіант встановлення рівноважних положень атомів для кожного збігу термодинамічних параметрів свій, але, за звичайних для Землі умов, в залежності від швидкості змін прикладеної зовнішньої сили, може змінюватися як зовсім пружньо (без структурних змін як за абсолютної крихкості) до певних граничних (мінімальних за стискання чи то максимальних за розтягу) значень параметрів ґратниць, так і послідовно, з поступовим набуванням зразками на різних стадіях пластичної деформації, в тому числі й за розтягу, нових властивостей і форм за відповідних структурних змін і зміцнень [24–40].

Оскільки вплив зовнішніх сил за різних силових схем навантажень завжди супроводжується виникненням у кристалічній ґратниці пар додаткових, взаємно ортогональних, пов'язаних між собою напружень, які розтягують і стискають міжатомові віддалі до встановлення нових рівноважних положень атомів (по відношенню до вихідних станів) вздовж ланцюжків з максимальною щільністю їхнього розташування, ці обставини було покладено у підґрунтя моделю, який розглядає міжатомові віддалі в таких ланцюжках як місця виникнення (в якій завгодно кристалічній ґратниці) відповідних реакцій, пов'язаних з їхнім розтягуванням або стисканням (пружнім збільшенням чи зменшенням параметрів). Водночас, зазначимо, що особливості розташування атомів та їхні зв'язки у системі ланцюжків з найщільнішим (базовим) розташуванням в об'ємі зразка фактично визначають їхні рівноважні положення в яких завгодно інших ланцюжках і кристалографічних напрямках ґрат-

ниць. Таким чином, уся система розподілу зовнішньої прикладеної сили по міжатомових зв'язках ґратниці зразка (конструкції) за навантажень сама (в межах своїх пружних властивостей) автоматично реорганізується шляхом встановлення вздовж ланцюжків з найщільнішим пакуванням атомів їхніх нових рівноважних положень, які за навантажень кожної миті змінюються шляхом встановлення нових рівнів пружної рівноваги між пов'язаними взаємно нормальними напруженнями розтягу та стискання. До того, за випробувань на розтяг площина рівноваги M_0H_0 між протилежно спрямованими силами розтягу поділяє робочу частину досконалого зразка (без дефектів і Кн) навпіл (рис. 1, а) разом з усіма подовжніми базовими атомарними ланцюжками.

В основі цього передбачення моделю лежать як проведені розрахунки, так і експериментальні результати випробувань на розтяг моно- та полікристалічних зразків як одного виду та розмірів, так і різних, котрі свідчать про те, що їхній абсолютній більшості, яка демонструє максимальні властивості, притаманне утворення шийок і площин усіх видів руйнування в місці серединного поперечного перетину їхніх робочих частин.

За визначенням, кожний рівень протилежно спрямованих вздовж зразка напружень розтягу одночасно викликає в усіх атомарних ланцюжках радіальних напрямків площини M_0H_0 відповідну максимальну реакцію ґратниці. На макромасштабному рівні вона виявляється у звужуванні зразка, яке є наслідком зменшень міжатомових віддалей не тільки в усіх радіальних ланцюжках M_0H_0 , а й у наближених до неї паралельних площинах. Таким чином, за експериментальними даними цей процес за кожної з прикладених ззовні сил (як за пружности, так і за пластичних релаксацій) викликає формування на поверхні зразка вздовж периметра M_0H_0 (в місцях перетинання подовжніх і поперечних ланцюжків) вершини макроскопічного комплексного стандартного поверхневого концентратора типу вилучення маси ($K_{\text{ксп}}^-$), який утворився завдяки пружнім зменшенням міжатомових віддалей у базових ланцюжках площин в околі M_0H_0 , а на макромасштабному рівні має вигляд шийки. Означене відбувається завдяки встановленню нових умов рівноваги між максимальними радіальними напруженнями стискання $\sigma_{\text{ст}}$ і подовжніми напруженнями розтягу $\sigma_{\text{рт}}$. Водночас, перші виникають за розтягу на бічній поверхні зразка вздовж периметра площини M_0H_0 , де розташована вершина $K_{\text{ксп}}^-$, а швидкість їхнього зростання, як показують розрахунки й експеримент, істотно випереджає $\sigma_{\text{рт}}$. Модель передбачає, що темп цього випередження для кожної з половин зразка є однаковим. Він прямо пропорційно залежить від швидкості зміни величини зовнішньої сили та співвідношення розмірних параметрів циліндричного зразка ($L/(2d)$).

На рисунку 2 представлено залежності змін співвідношень розмірних параметрів трьох видів циліндричних зразків з різними довжинами робочих частин від їхніх діаметрів.

Наведене демонструє, що для якої завгодно кількості зразків з різними розмірними параметрами робочих частин можна ще до випробувань визначити напрямки дії та перевагу темпу зростання напружень, які викликають за розтягу природне стискання (вкорочування) міжатомових віддалей вздовж атомарних ланцюжків радіальних напрямків у площинах поперечних перетинів типу M_0H_0 над

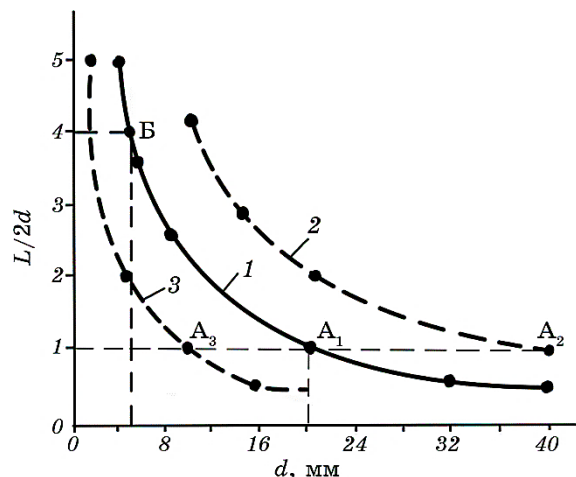


Рис. 2. Залежності 1–3 змін співвідношень розмірних параметрів циліндричних зразків з довжинами робочих частин L у 40, 80 і 20 мм від їхніх діаметрів d за розтягу відповідно. Точками А1–А3 позначено випадки, коли $L/(2d) = 1$ для всіх зразків, що відповідає обставинам, за яких напруження розтягу та стискання, які діють на міжатомові віддалі подовжніх і поперечних базових ланцюжків у вершинах $K_{\text{ксемп}}$, під час розтягу є весь час однаковими та перебувають у стані пружної рівноваги, в той час як за інших співвідношень вони невірні за відповідних переваг у темпах зростання напружень стискання, що відповідають певним значенням співвідношень $L/(2d)$.

Fig. 2. Dependences 1–3 of variations in the dimensional parameter ratios of cylindrical specimens with gauge lengths L of 40, 80, and 20 mm on their diameters d under tensile loading, respectively. Points A1–A3 mark the cases, where $L/(2d) = 1$ for all specimens that corresponds to the conditions, under which the tensile and compressive stresses acting on the interatomic distances of the longitudinal and transverse basic chains at the vertices of $K_{\text{ксемп}}$ during tension remain identical and are in a state of elastic equilibrium, whereas, at other ratios, they are unbalanced, with corresponding advantages in the rates of growth of compressive stresses, which correspond to specific values of the $L/(2d)$ ratios.

темпом зростання за навантажень первинних напружень розтягу в подовжніх ланцюжках. Обидва напруження виникають у кристалічній ґратниці внаслідок суперпозиції прикладеної зовнішньої сили з силами пружної міжатомової взаємодії, котрі утримують усі атоми зразка в стані пружної рівноваги й одночасно забезпечують його цілісність.

Причинами невірноважености цих сил є не тільки різні точки та напрямки прикладання зовнішніх сил, а й довжини ланцюжків і відповідні кількості міжатомових віддалей вздовж них у подовжньому та поперечному напрямках, причому співвідношення останніх визначають умови розкладу зовнішньої сили у означених напрямках, а відповідно, й різницю в темпах зростання напружень у вершині кожного $K_{\text{ксемп}}^-$, які формують не тільки вершину макроскопічного $K_{\text{ксп}}^-$, а й усю його бічну поверхню у вигляді шийки. Водночас, кількість міжатомових віддалей вздовж кожного з ланцюжків пропорційна їхнім довжинам, а відповідно, й релаксацийним можливостям, які значно менші за чисто пружні зміни у радіальних напрямках відносно подовжніх. Таким чином, вершини найпотужніших $K_{\text{ксемп}}^-$ зосереджено вздовж лінії перетинання площини M_0H_0 з бічною поверхнею зразка за поступового зменшення їхніх потужностей в міру віддалення від M_0H_0 як вздовж робочої частини зразка, так і в її радіальних напрямках.

Практичне значення наведеного на рис. 2 полягає в тому, що означений підхід уможливорює з'ясувати ще до випробувань для кожного виду зразків з якими завгодно розмірами та формами робочих частин не тільки відповідні переваги темпів зростання напружень стискання навіть у випадках різної довжини радіальних ланцюжків у площині втрати механічної стійкості відносно напружень розтягу в подовжніх ланцюжках, а й розглядати особливості поведінки вздовж них міжатомових віддалей ґратниці в залежності від напрямків дії та різних швидкостей їхнього зростання як на початкових (пружних), так і на наступних стадіях навантаження. В свою чергу, це дає змогу розраховувати зміни напружень розтягу та стискання не тільки вздовж поверхні циліндричного зразка у вершині $K_{\text{ксп}}^-$, а й усередині його об'єму у вершинах усіх внутрішніх $K_{\text{ксев}}$ на різних стадіях навантаження.

Водночас, величини нерелаксованих напружень розтягу вздовж поверхні зразка ($\sigma_{\text{ртп}}$) набувають ще й ортогонально спрямованих відносно осі z більш потужних складових. Ці складові викликані спрямованими від вершин $K_{\text{ксемп}}^-$ до центру площини M_0H_0 напруженнями стискання міжатомових віддалей ($\sigma_{\text{ст}}$), які для нашого зразка (у відповідності зі співвідношенням $L/(2d)$ — залежність 1, точка Б, рис. 2) в 4 рази переважають за величиною та швидкістю зростання прикладені первинні напруження розтягу ($\sigma_{\text{пр}}$), спрямовані у протилежних напрямках вздовж осі z . Зазначимо, що запро-

понована схема розподілу напружень стискання та розтягу (рис. 1, б) не суперечить експериментальним результатам [21–27], але істотно розширює уявлення про закономірності формування та зміни їхніх величин на різних масштабних рівнях атомарної будови досконалих ґратниць як вздовж, так і впоперек робочих частин зразків за розтягу. Зокрема, вона свідчить про виникнення на перших двох стадіях деформації розтягом кількох площин поперечних перетинів з різними темпами зростання напружень розтягу та стискання. Так, у площині M_0H_0 (за експериментальними даними) і за умовами моделю за навантажень на міжатомовому рівні взаємодії виникають максимальні (для кожної зовнішньої сили) напруження стискання, які пов'язані з однаковими зменшеннями міжатомових віддалей тільки вздовж базових ланцюжків її радіальних напрямків з максимальною щільністю розташування атомів. Це супроводжується відповідними укорочуваннями ланцюжків за формування на макромасштабному рівні поверхонь циліндричних зразків макроскопічних шийок. Означений процес пов'язано з поступовим зростанням за навантажень нормальних до площини M_0H_0 , протилежно спрямованих сил розтягу за умов їхнього рівномірного розкладу по певних кількостях міжатомових віддалей вздовж базових атомарних ланцюжків обох протилежних подовжніх напрямків.

Крім цього, експериментальні результати свідчать, що наведена схема розподілу напружень розтягу та стискання на перших двох стадіях пластичної деформації супроводжується появою ще двох площин поперечних перетинів, паралельних до M_0H_0 з центрами O1 і O2 (рис. 1). Обидві за навантажень рухаються на чолі фронтів зміцнення в протилежних напрямках від M_0H_0 і поділяють обидві половини робочої частини зразка на деформовану та недеформовану. Означені площини відрізняються від M_0H_0 тим, що вони є рухомими, а напруження розтягу та стискання в них лежать у межах рівноваги між різними запасами пружності подовжніх і радіальних базових атомарних ланцюжків, кожна пара яких за перетинання утворює вершину комплексного стандартного елементарного мікроскопічного поверхневого концентратора (Кксемп) або його внутрішнього аналога (Кксев). Водночас, рівновага напружень в їхніх вершинах (поза межею пружності базових ланцюжків радіальних напрямків) досягається за дії механізмів пластичної релаксації, які забезпечують відповідні зміцнення подовжніх ланцюжків завдяки надходженню до них певних кількостей дефектів «втління» у вигляді вакансій і дислокацій з боку прилеглих стиснених приповерхневих ділянок. На макромасштабному рівні ці процеси зосереджено всередині ліній ковзання або полос Чернова–Людерса за їхніх поширень за пластичних деформацій у межах поличок плинності моно- або полікристалів відповідно. В обох випадках ці площини формуються по обидва боки від M_0H_0 , де зосереджено максимум

ми деформаційних зміцнень, і збігаються з фронтами їхнього розповсюдження та рухаються з ними в протилежних напрямках вздовж подовжньої осі зразка аж до кінця його робочої частини. В той же час в інтервалах $O-O_1$ та $O-O_2$ згідно рис. 1, б в усіх площинах, паралельних до M_0H_0 , з їхнім віддаленням від неї відбувається послідовне зменшення рівнів зміцнення, а відповідно, й сил стискування на фоні підвищення тих, які локалізовано розтягують поверхневі базові ланцюжки атомів у радіальних напрямках площини M_0H_0 .

Це — процес за навантажень у межах пружности подовжніх базових ланцюжків атомів поверхневого шару $\sigma_{\text{прп}}$, яка за умовами моделю вдвічі менша за пружність всередині зразка ($\sigma_{\text{пр}}$). Означене пов'язане з тим, що кількість атомів, які оточують кожний атом всередині зразка заліза, як мінімум, вдвічі перевищує кількість його сусідів у поверхневому шарі, що сприяє менш цупким умовам утримання атомів поверхневого шару в стані рівноваги. Це не суперечить літературним даним [41–44] та сприяє за навантажень первинним пересуванням вершин $K\text{ксемп}^-$ разом з розташованими у них поверхневими атомами в радіальних напрямках площини M_0H_0 , де і відбувається, за досягнення межі пружности поверхневого шару, первинна втрата механічної стійкості зразка. Цей процес продовжується аж до моменту встановлення рівноваги у вершинах K між напруженнями стискування та викликаних ними в поверхневих шарах відповідних додаткових напружень розтягу, котрі на початковій стадії процесу спрямовані в радіальних напрямках. Водночас, слід додати, що потужності всіх означених $K\text{ксемп}^-$, розташованих і вздовж бічних поверхонь шийки, зменшуються з наближенням до площин з центрами у O_1 і O_2 , а рівень рівноваги напружень розтягу та стискування у їхніх вершинах лежить, з одного боку, в межах запасу пружности базових радіальних ланцюжків, яка пропорційна їхнім довжинам, а з другого боку, розташований у межах значно більших запасів пружних властивостей подовжніх ланцюжків, довжина яких у рази більша. Потужності $K\text{ксемп}^-$, що розташовані в площині M_0H_0 , з переходом деформації на полиці плинності як моно-, так і полікристалічних станів сягають певних меж. У монокристалах вони значно вищі, як і твердості, за відповідні полікристалічні стани, але в межах полицок плинності обидва параметри залишаються різними, але практично незмінними аж до завершення кожної з полицок, коли обидва фронти зміцнення разом з вершинами $K\text{ксп}^-$ зупиняються з набуванням всією робочою частиною певного рівня деформаційного зміцнення за відповідного для даного зразка збільшення її довжини та звужування. Означене відбувається на фоні насичення приповерхневого об'єму робочої частини на певну глибину максимальними кількостями дефектів «втілення», які на полиці плинності набувають стану типу «ліс»

як в моно-, так і полікристалах за його наступної перебудови (на стадії деформаційного зміцнення) в комірчастій структури, які з наближенням до межі міцності поступово подрібнюються до мінімуму (0,1–0,15 мкм) [45]. Як в моно-, так і в полікристалах означені процеси реалізуються за аналогічними сценаріями послідовного утворення нових $K_{\text{ксп}}^-$ у вигляді шийок та їхнього розвитку вздовж робочих частин аж до їхніх зміцнень до межі міцності (σ_m).

Таким чином, природне утворення за навантажень (на всіх масштабних рівнях атомарної будови ґратниць металевих матеріалів) стандартних елементарних $K_{\text{се}}^\pm$ пов'язане зі збільшеннями та зменшеннями міжатомових віддалей вздовж кожної пари базових ланцюжків подовжнього та поперечного напрямків, які за попарних перетинань формують вершини комплексних K різних видів як внутрішнього, так і поверхневого ґатунку в околі площини M_0H_0 . Водночас, зростання напружень розтягу та стискання в їхніх вершинах сприяє втраті механічної стійкості досконалого зразка у площині серединного поперечного перетину M_0H_0 на фоні послідовного зміцнення приповерхневого шару робочої частини за рахунок насичення дефектами «втілення» та наслідків їхньої перебудови в границі комірчастих структур, комірки яких подрібнюються, коли на макрорівні означене супроводжується послідовними звужуваннями та видовженнями зразків з їхніми відповідними зміцненнями. За таких обставин стає очевидним, що відповідальність за темп звужування у кожній точці поверхні шийки несуть особливості суперпозиції сил міжатомової взаємодії вихідного стану (до випробувань) з тими, які виникають за випробувань вздовж задіяних базових ланцюжків як в площині M_0H_0 , так і в її околах, де зосереджено усі $K_{\text{ксемп}}^-$, які утворюють бічні поверхні $K_{\text{ксп}}^-$ у вигляді макроскопічної шийки. Напруження розтягу та стискання за випробувань в паралельних по обидва боки від M_0H_0 площинах зростають нерівномірно, а рівновага між ними у вершинах K усіх масштабних рівнів (вузлах перетинання кожної пари ланцюжків подовжнього та поперечних напрямків) досягається за поступового накопичення до максимуму точкових і лінійних дефектів «втілення», котрі забезпечують на кожній стадії деформації відповідні послідовні вичерпування пружних властивостей питомого зразка тільки в подовжніх напрямках. Оскільки чисельність задіяних міжатомових зв'язків у напрямках розтягу та стискання за дії кожної зовнішньої сили впливає на рівні та характери зростання напружень по міжатомових віддальях відповідних ланцюжків, це надало підстави вважати, що співвідношення розмірних параметрів зразка з одного боку є визначальним щодо виявлення кількостей таких віддалей у базових ланцюжках подовжнього та радіальних напрямків циліндричного зразка заліза, котрі є важливими за розкладу ззовні прикладеної сили на складові не тільки за кількістю ланцюжків у кожному з на-

прямків, а й за чисельністю задіяних у них міжатомових зв'язків. Означене, всупереч до положень модель ізотропного тіла, вказує на залежність величин напружень розтягу та стискання, а відповідно, й механічних властивостей досконалого зразка не тільки від виду (видів) атомів його ґратниці, а й від співвідношення розмірів його робочої частини у подовжньому та поперечному напрямках, оскільки воно є відповідальним за кількості та потужності $K_{ксев}$ і $K_{ксемп^-}$ атомарного походження, а також і від довжини ланцюжків, які утворюють їх і визначають рівні та темпи зростання напружень стискання та розтягу у вершинах. Останнє набуває особливого значення за оцінки величин напружень, які діють вздовж кожної міжатомової віддалі вздовж ланцюжків відповідних напрямків за випробувань зразків різних розмірів. Все означене уможливорює представити ланцюжки з найщільнішим (базовим) пакуванням атомів, віддалі між якими розтягуються чи то стискаються, відповідними первинними стандартними елементарними $K_{се^-}$ вилучення або втілення маси $K_{се^+}$. Такі первинні K атомарного рівня (походження) можуть змінювати в залежності від напрямку дії зовнішньої сили не тільки свої види, а й напрямки дії напружень розтягу та стискання у вершинах за надавання кожному ланцюжку, що розтягується та стискається, ознак стандартних елементарних концентраторів напружень відповідних типів — розтягу $K_{се^-}$ та стискання $K_{се^+}$. До цього слід додати, що вони напряду пов'язані з атомарною будовою матеріалу (конструкції) зразка та, як і всі інші, можуть мати різні розміри (довжини), кількості та потужності. Крім цього, означені параметри здатні змінюватися не тільки від величини та швидкості зміни зовнішньої прикладеної сили, а й розмірних параметрів і форм зразків, елементів їхніх структур, їхніх кристалографічних ознак і розмірів, наявності різних типів меж та особливостей зв'язків вздовж них. Означене може впливати не тільки на збільшення кількостей обох видів комплексних K атомарного походження, що пов'язано з подрібненням базових ланцюжків атомів та змінами їхніх напрямків, а й утворенням додаткових кількостей більш небезпечних K^- , представлених межами з послабленими зв'язками.

Таким чином, атомарні базові ланцюжки з найщільнішим пакуванням атомів, віддалі між якими розтягуються або стискаються за навантажень, можуть бути представлені як в досконалих, так і реальних зразках в якості K вилучення та втілення маси, яких у роботі визначено як $K_{се^-}$ та $K_{се^+}$. Вони формують у виробі за навантажень цілу групу первинних K атомарного походження (на всіх масштабних рівнях атомарних будов ґратниць). А це суттєво доповнює уявлення про K , закономірності їхнього утворення, структуру, чисельність видів, рухомість, кількість у кожному виді, потужності й умови взаємодії в межах розуміння їхньої ролі в особливостях фо-

рмування та визначення механічних і службових характеристик металевих виробів за різних умов випробувань або експлуатації. Зазначимо, що частина найменших елементів простору у вигляді міжатомових віддалей у реальних і досконалих станах кристалічних ґратниць металевих матеріалів є первинною та спільною, а їхні особливості (довжини та поведінка) визначаються видами атомів [46, 47].

Таким чином, елементи простору у вигляді міжатомових віддалей вздовж ланцюжків з базовим розташуванням атомів, їхні величини (параметри) й особливості змін як до, так і під час встановлення нових рівноважних положень вершин K забезпечують в усіх випадках на різних масштабних рівнях будови металевих матеріалів реалізацію їхніх пружних і релаксаційних можливостей за поставленої участі різноманітних механізмів пластичної або крихкої релаксації напружень. Особливості змін останніх в околах вершин K як за випробувань, так і під час експлуатації залежать від величин і швидкості зростання прикладеної зовнішньої сили з врахуванням змін співвідношень розмірних параметрів зразків, котрі регламентують підвищені рівні та швидкості змін напружень стискання, які є першопричиною появи в поверхневому шарі площини M_0H_0 вершини первинного $K_{\text{ксп}}^-$, відповідального за наступний розвиток усіх релаксаційних процесів. Ці можливості пов'язані з залежністю умов міжатомової взаємодії від швидкостей зростання рівнів напружень стискання та розтягу вздовж базових ланцюжків, причому величини та співвідношення цих напружень визначають умови генерації, напрямки переміщення, взаємодії й утримання та накопичення у певних об'ємах матеріалу підвищених кількостей дефектів «втілення», які забезпечують відповідні зміцнення. До того ж пружні властивості матеріалів на атомарному масштабному рівні визначаються обмеженими можливостями електронних систем атомів, здатних тільки в певних межах до повністю або частково зворотніх змін міжатомових віддалей за встановлення пружних рівноваг між атомами за умов збереження цілісності зразка. Зазначимо, що усі елементи простору (утворення типу вилучення маси, порожнини, тріщини тощо), які (в рази) більші за розмірами, ніж стандартні міжатомові віддалі, незалежно від їхнього походження, форми та місця розташування в реальних конструкціях, названо нестандартними концентраторами вилучення маси (K_n^-). Водночас, усі вони у похідних станах (до навантаження) представлені порожнинами різних розмірів, які перевищують величини міжатомових віддалей базових ланцюжків ґратниць і мають вільні внутрішні поверхні, котрі також можуть бути представлені у вигляді відповідних наборів стандартних елементарних $K_{\text{се}}^+$ або їхніх комплексів у вигляді вершин комплексних стандартних елементарних мікроскопічних поверхневих $K_{\text{ксемп}}^-$ внутрішнього ґатунку. «Де тонко,

там і рветься» — цей вислів дуже добре віддзеркалює вплив різного роду порожнин типу K_n^- всередині та на поверхнях реальних зразків на погіршення їхніх службових характеристик.

У першу чергу це пов'язане з тим, що статистичний розподіл дефектів типу вилучення маси (порожнин), представлених в якості K_n^- , веде до фактично неврахованого зменшення дійсних площ поперечних перетинів зразків відносно їхніх розрахункових значень з усіма наслідками у вигляді несподіваних втрат механічної стійкості. Подібні втрати пропорційні невідомому внеску з боку всього набору присутніх порожнин — K_n^- не тільки до втрати певної частини (неврахованої) маси виробів, а й впливу цього процесу на розподіл напружень, які виникають під дією макроскопічної сили розтягу, вздовж міжатомових віддалей базових ланцюжків досконалої ґратниці за появи в їхніх структурах порушень у вигляді розривів. За аналогією усі K_n представлено також двома видами — втілення маси (K_n^+) і її вилучення (K_n^-). Перші формуються вздовж міжфазних меж, міжатомові віддалі в спільних ланцюжках атомів між сусідами стискаються, а другі пов'язані з нормальними до площини меж напруженнями розтягу. Загалом подібне відбувається, коли базові ланцюжки матриці стикаються з когерентними, напівкогерентними або некогерентними межами елементів структури, які можуть сприяти за навантажень утворенню вздовж них більш потужних K_n^- у вигляді пор (тріщин) деформаційного походження або K_n^+ , пов'язаних з можливим виникненням вздовж таких меж ділянок із станом стиснення міжатомових віддалей. У запропонованому моделю може розглядатись як відокремлене існування у вихідних станах усіх зазначених типів K , так і їхній взаємочин з подібними або такими, котрі виникають за навантаження вздовж базових ланцюжків на атомарному рівні їхньої будови.

Модель передбачає, що пари $K_{ксемп}^-$, які виникають на атомарному рівні будови ґратниці за навантаження по обидва боки від M_0H_0 , можуть бути об'єднані між собою з утворенням на атомарному рівні будови повного профілю макроскопічної шийки. Кожна мікроскопічна вершина утримує атом, на який діє трійка векторів напружень, два з яких спрямовані в протилежні боки вздовж подовжніх ланцюжків атомів, які розтягуються відносно M_0H_0 , а третій розташований у її радіальних напрямках. Зазначимо, що кожне угруповання з таких ланцюжків у місцях їхнього перетинання всередині об'єму зразка утворює відповідну внутрішню вершину. Потужності мікро- та макроскопічних K , як і їхніх складових, завжди збільшуються з наближенням до площини M_0H_0 , а в ній зростають у напрямку від її центра до бічної поверхні зразка, причому напрямки руху вершин $K_{ксемп}^-$, що утворюються на поверхнях, як і атомів, які в них знаходяться, визначаються співвідношеннями величин відповідних напружень розтягу та стиснення. Таким чином,

подібні набори вершин $K_{\text{ксемп}}^-$, які знаходяться вздовж периметрів площин M_0H_0 та її сусідок у верхній і нижній частинах зразка з досконалою ґратницею, формують за навантажень макроскопічний $K_{\text{ксп}}^-$ у вигляді шийки та регламентують появу нових вершин подібних мікроскопічних поверхневих $K_{\text{ксемп}}^-$ вздовж поверхонь усіх, як нестандартних $K_{\text{н}}^-$, так і їхніх різновидів, зосереджених вздовж меж зерен у полікристалах. Це стосується всіх шийок, які за експериментальними даними утворюються за розтягу на бічних поверхнях робочих частин зразків як за пружних, так і на початку кожної стадії пластичної деформації за розтягу в інтервалах напружень від 0 до $\sigma_{\text{м}}$ і за усіх видів руйнувань в інтервалах $\sigma_{\text{м}} - \sigma_{\text{р}}$. Поверхні таких шийок на макрорівні мають вигляд локалізованих звужувань робочих частин, пов'язаних з відповідними зменшеннями радіусів певної кількості паралельних площин, наближених до M_0H_0 . Її розташування вздовж подовжньої осі в досконалих і реальних зразках збігається з траєкторіями втрат механічних стійкостей, у тому числі й за руйнувань.

Так, в'язке руйнування зразка з ідеальною будовою кристалічної ґратниці відбувається за участі найбільш небезпечного набору комплексних стандартних елементарних мікроскопічних поверхневих $K_{\text{ксемп}}^-$, зосереджених вздовж поверхні шийки по обидва боки від M_0H_0 у верхній і нижній половинах зразка; причому у реальних зразках поверхня шийки формується за участі усіх присутніх K стандартного та нестандартного походження за умов знаходження останніх у площині M_0H_0 . Ця обставина сприяє формуванню на поверхнях $K_{\text{н}}^-$ нових, більш гострих вершин, які утворюються всередині зразка вздовж ліній перетинання поверхонь внутрішніх $K_{\text{н}}^-$ з площиною втрати механічної стійкості. Згідно з цим, позначимо такі K як комплексні внутрішні стандартні поверхневі ($K_{\text{квсп}}^-$). Загалом, коли потужність $K_{\text{н}}^-$, який знаходиться в іншому місці об'єму зразка, переважає потужність $K_{\text{ксп}}^-$, що може сформуватися в його досконалому стані, це може змінювати місце розташування траєкторії втрати. У той же час абсолютно крихке руйнування «ідеального» зразка відбувається за участі одного найбільш небезпечного зовнішнього (гострого, потужного) $K_{\text{ксп}}^-$ у вигляді пружної шийки з вершиною, сформованою на атомарному рівні будови вздовж периметра M_0H_0 за екстремальної для даного зразка швидкості навантаження та повного пригнічення діяльності усіх механізмів пластичної релаксації [2, 4–9]. Місце розташування траєкторії подібного руйнування реального зразка, в тому числі в інтервалі крихко-в'язкого переходу, може змінюватися відносно його досконалого стану у відповідності до переваги умов руйнування у вершині самого небезпечного внутрішнього $K_{\text{квсп}}^-$, сформованого вздовж поверхні $K_{\text{н}}^-$ в іншій площині поперечного перетину на мінімальній глибині від поверхні. До цього слід додати, що

усі вектори напружень стискання вздовж ланцюжків радіальних напрямків, розташованих у площині M_0H_0 (вершинах $K_{ксев}$ і $K_{ксемп}$), спрямовані до її центру (О), який (за досконалої ґратниці) знаходиться на подовжній осі зразка (рис. 1). Таким чином, площа поперечного перетину M_0H_0 , вздовж периметру якої зосереджено максимальний сумарний ефект від укорочення усіх міжатомових віддалей вздовж атомарних ланцюжків її радіальних напрямків, проходить крізь вершину $K_{ксп}$ (макроскопічної шийки). Вона, як у зразках з досконалою, так і реальною будовами ґратниць, формує природній $K_{ксп}$, який є повним аналогом штучних поверхневих K^- , котрі використовуються в механіці. Поверхні усіх макро- та мікроскопічних зовнішніх і внутрішніх K_n^- (у вигляді різних порожнин з більшими за міжатомові віддалі розмірами) мають однакову атомарну будову. Її представлено (подібними до вже розглянутих) парами з подовжнього та поперечного базових ланцюжків, котрі перетинаються у подібних до M_0H_0 площинах з утворенням нових вершин комплексних внутрішніх стандартних елементарних мікроскопічних поверхневих K^- ($K_{квсемп}$). Їхні відповідні набори перетворюють первинні K_n^- у більш небезпечні. Таким чином, у запропонованому моделю процес утворення K на усіх масштабних рівнях атомарної будови кристалічних ґратниць металевих матеріалів аж до макрошийки з вершиною, розташованою в поверхневому шарі зразка в площині втрати його механічної стійкості, отримав не тільки логічний зв'язок, а й фізичне обґрунтування, яке надає можливість пояснювати усі експериментальні результати, причому вказано на безпосередній зв'язок усіх K атомарного рівня будови досконалої ґратниці з іншими видами K , які можуть бути присутні в реальних металевих матеріалах і виробих, та визначено їхню відповідальність за формування механічних і службових характеристик виробів як в межах пластичних, так і крихких релаксацій. Завдяки закладеним первинним принципам, що пов'язані з першопричинами явищ, які відбуваються, запропонований модель має практично необмежене металевими матеріалами поле використання, яке може бути поширене не тільки на інші цілісні, тверді кристалічні та некристалічні тіла, а й біологічні об'єкти та ґрунти. Як виявляється, справа пов'язана з визначенням величин відповідних структурних елементів та умов зв'язків їх за втрат механічної стійкості.

4. ВИСНОВКИ

Запропоновані уявлення про K добре узгоджуються з експериментальними та теоретичними результатами, одержаними як на моно-, так і на полікристалічних станах різних металів та їхніх стопів. Модель здатний прогнозувати шляхи розвитку процесів за пласти-

чних і крихких релаксацій за будь-яких схем випробувань і швидкостей навантажень завдяки покладеним в його основу принципам первинного утворення K напружень на атомарному рівні будови кристалічних ґратниць металевих матеріалів. Означене дає змогу вперше напряму зв'язати особливості поведінки атомарної будови металевих матеріалів за їхніх випробувань з макроскопічними особливостями розмірних параметрів виробів і визначенням провідної ролі їхніх співвідношень у формуванні уявлень про шляхи релаксаційних процесів, які відбуваються та є відповідальними за рівні механічних і службових характеристик, які залежать не тільки від змін термодинамічних параметрів, а й від швидкості навантаження, яке, в залежності від співвідношень розмірних параметрів, регламентує відповідні різниці в рівнях і швидкостях зростання напружень у вершинах K , які природнім шляхом виникають під дією тих же напружень на зовнішніх і внутрішніх поверхнях всередині зразків за взаємодії з іншими K нестандартного та випадкового походження.

Все наведене свідчить про те, що запропонований модель, заснований на первинних принципах взаємодії атомів металевих ґратниць, пов'язаних з реальними змінами їхніх міжатомових віддалей за навантажень з усіма наслідками, є більш досконалим і прогресивним, в тому числі й за одержаними результатами, у порівнянні з моделями, заснованими на *ab initio*-розрахунках або використанні методів молекулярної та 2D- й 3D-дислокаційних динамік [47–54].

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Г. Нейбер, *Концентрация напряжений* (Москва–Ленинград: ОГИЗ ГИТТЛ: 1947) (пер. з. нім.).
2. П. Ю. Волосевич, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 10: 1393 (2007).
3. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, *Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции* (Киев: Наукова думка: 2008).
4. П. Ю. Волосевич, *Сборник научных трудов Международной конференции «Механика разрушения материалов и прочность конструкций»* (Львов: 2009), с. 93.
5. П. Ю. Волосевич, *Успехи физики металлов*, **12**, № 3, 367 (2011).
6. П. Ю. Волосевич, *Сборник научных трудов Международной конференции «Механика разрушения материалов и прочность конструкций» (24–27 июня 2014 г.)* (Львов: 2014), с. 157.
7. Ю. Я. Мешков, С. А. Котречко, А. В. Шиян, *Механическая стабильность металлов и сплавов* (Киев: Наукова думка: 2014).
8. П. Ю. Волосевич, А. В. Шиян, *Сталь*, № 6: 58 (2015).
9. П. Ю. Волосевич, *Успехи физики металлов*, **19**, № 2: 157 (2018).
10. В. Е. Панин, В. А. Лихачёв, О. В. Гриняев, *Структурные уровни деформации твердых тел* (Москва: Наука: 1985).
11. Г. Хакен, *Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся*

- системах и устройствах* (Москва: Мир: 1985) (пер. з. англ.).
12. В. Й. Сугаков, *Основы синергетики* (Київ: Оберіги: 2001).
 13. С. С. Горелик, Л. Н. Расторгуев, Ю. А. Скаков, *Рентгенографический и электроннооптический анализ* (Москва: Металлургия: 1976).
 14. Z. S. Basinski and J. W. Christian, *Proc. Roy. Soc. A*, **223**: 554 (1954).
 15. I. Leonov, A. I. Poteryaev, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, *Sci. Rep.*, **4**: 55 (2014).
 16. Е. В. Сударикова, *Неразрушающий контроль в производстве* (Санкт-Петербург: 2007).
 17. *Колебания и волны, Оптика, атомная и ядерная физика: Элементарный учебник физики* (Ред. Г. С. Лансберг) (Москва: Наука: 2003).
 18. А. М. Афонин, *Физические основы механики* (Москва: Издательство МГТУ им. Баумана: 2006).
 19. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела* (Москва: Мир: 1966) (пер. з. англ.).
 20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости* (Москва: Наука: 1965).
 21. А. М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки* (Москва: Наука: 1972).
 22. Дж. Рейсленд, *Физика фононов* (Москва: Мир: 1975) (пер. з. англ.).
 23. И. Х. Бадамшин, *От четырех к одному. Силы внутреннего взаимодействия и прочность материалов* (Москва: Издательский дом Академии: 2016).
 24. П. Ю. Волосевич, *Металлофиз. новейшие технол.*, **16**: 1179 (1997).
 25. И. Я. Перлин, М. З. Ерманок, *Теория волочения* (Москва: Металлургия: 1971).
 26. Н. Н. Давиденков, Н. И. Спиридонова, *Заводская лаборатория*, № 11: 583 (1945).
 27. В. И. Резников, В. М. Сегал, *Проблемы прочности*, № 1: 78 (1980).
 28. П. Ю. Волосевич, Т. Н. Сердитова, *Порошковая металлургия*, № 5: 67 (1988).
 29. П. Ю. Волосевич, В. А. Москаленко, Т. Н. Сердитова, В. И. Еремин, *Металлофизика*, **8**, № 3: 111 (1986).
 30. П. Ю. Волосевич, Ю. Я. Мешков, Т. Н. Сердитова, *Металлофизика*, **7**, № 3: 93 (1985).
 31. С. А. Фирстов, *Прогрессивные материалы и технологии* (Киев: 2003), т. 2, с. 610.
 32. В. И. Трефилов, В. Ф. Моисеев, Э. П. Печковский, И. Д. Горная, А. Д. Васильев, *Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов* (Киев: Наукова думка: 1979).
 33. Д. МакЛин, *Механические свойства металлов* (Москва: Металлургия: 1965) (пер. з. англ.).
 34. Р. Бернер, Г. Кронмюллер, *Пластическая деформация монокристаллов* (Москва: Мир: 1969) (пер. з. нім.).
 35. В. И. Трефилов, Ю. В. Мильман, С. А. Фирстов, *Физические основы прочности тугоплавких металлов* (Киев: Наукова думка: 1975).
 36. Т. Екобори, *Научные основы прочности и разрушения материалов* (Киев: Наукова думка: 1978) (пер. з. япон.).
 37. Дж. Нотт, *Основы механики разрушения* (Москва: Металлургия: 1978) (пер. з. англ.).
 38. О. Н. Романив, *Вязкость разрушения конструкционных сталей* (Москва: Металлургия: 1979).
 39. В. Т. Трощенко, *Деформирование и разрушение металлов при многоцикловом нагружении* (Киев: Наукова думка: 1981).

40. Р. Хоникомб, *Пластическая деформация металлов* (Москва: Мир: 1972) (пер. з. англ.).
41. В. П. Алехин, *Физика прочности и пластичности поверхностных слоёв материалов* (Москва: Наука: 1983).
42. В. С. Иванова, В. Ф. Терентьев, *Физика и химия обработки материалов*, **1**: 79 (1970).
43. В. С. Иванова, В. Ф. Терентьев, В. Г. Пойда, *Металлофизика*, № 43: 63 (1972).
44. В. Ф. Терентьев, *Усталость металлических материалов* (Москва: Наука: 2003).
45. П. Ю. Волосевич, *Металлофиз. новейшие технол.*, **18**, № 10: 63 (1996).
46. И. В. Гаврилин, *Металлургия машиностроения*, № 4: 10 (2002).
47. И. В. Гаврилин, *Плавление и кристаллизация металлов и сплавов* (Владимир: ВлГУ: 2000).
48. С. В. Дмитриева, А. А. Овчаров, М. Д. Старостенков, Э. В. Козлов, *Физика твёрдого тела*, **38**, № 6: 1805 (1996).
49. Ю. Я. Мешков, А. В. Шиян, О. В. Зацарна, *Металлофиз. новейшие технол.*, **42**, № 7: 1029 (2020).
50. С. А. Котречко, А. В. Филатов, А. В. Овсянников, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 1: 115 (2007).
51. Л. Б. Зуев, С. А. Баранникова, А. Г. Лунев, *Успехи физики металлов*, **19**, № 4: 379 (2018).
52. В. Е. Панин, В. Е. Егорушкин, А. В. Панин, А. Г. Чернявский, *Физическая мезомеханика*, **19**, № 1: 31 (2016).
53. S. Schönecker, X. Li, B. Johansson, S. K. Kwon, and L. Vitos, *Sci. Rep.*, **5**: 14860 (2015).
54. A. Patra, J. E. Bates, J. Sun, and J. P. Perdew, *PNAS*, **114**: E9188 (2017).

REFERENCES

1. H. Neuber, *Kontsentratsiya Napryazheniy* [Stress Concentration] (Moskva–Leningrad: OGIZ GITTL: 1947) (Russian translation).
2. P. Yu. Volosevych, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **29**, No. 10: 1393 (2007) (in Russian).
3. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Predel'naya Prochnost'. Kristally, Metally, Konstruktsii* [Ultimate Strength. Crystals, Metals, Structures] (Kiev: Naukova Dumka: 2008) (in Russian).
4. P. Yu. Volosevych, *Proc. of Int. Conf. 'Fracture Mechanics of Materials and Strength of Structures'* (Lviv: 2009), p. 93 (in Russian).
5. P. Yu. Volosevych, *Usp. Fiz. Met.*, **12**, No. 3, 367 (2011) (in Russian).
6. P. Yu. Volosevych, *Proc. of Int. Conf. 'Fracture Mechanics of Materials and Strength of Structures' (June 24–27, 2014)* (Lviv: 2014), p. 157 (in Russian).
7. Yu. Ya. Meshkov, S. A. Kotrechko, and A. V. Shiyani, *Mekhanicheskaya Stabilit'nost' Metallov i Splavov* [Mechanical Stability of Metals and Alloys] (Kiev: Naukova Dumka: 2014) (in Russian).
8. P. Yu. Volosevych and A. V. Shiyani, *Stal'*, No. 6: 58 (2015).
9. P. Yu. Volosevich, *Usp. Fiz. Met.*, **19**, No. 2: 157 (2018) (in Russian).
10. V. E. Panin, V. A. Likhachev, and O. V. Grinyaev, *Strukturnyye Urovni Deformatsii Tverdykh Tel* [Structural Deformation Levels of Solids] (Moskva: Nauka: 1985) (in Russian).

11. H. Haken, *Sinergetika. Iyerarkhiya Neustoychivostey v Samoorganizuyushchikhsya Sistemakh i Ustroystvakh* [Advanced Synergetics: Instability Hierarchies of Self-Organizing Systems and Devices] (Moskva: Mir: 1985) (Russian translation).
12. V. Y. Suhakov, *Osnovy Synergetiky* [Fundamentals of Synergetics] (Kyiv: Oberihy: 2001) (in Ukrainian).
13. C. C. Gorelik, L. N. Rastorguev, and Yu. A. Skakov, *Rentgenograficheskiy i Ehlektronnoopticheskiy Analiz* [X-Ray and Electron-Optical Analysis] (Moskva: Metallurgiya: 1976) (in Russian).
14. Z. S. Basinski and J. W. Christian, *Proc. Roy. Soc. A*, **223**: 554 (1954).
15. I. Leonov, A. I. Poteryaev, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, *Sci. Rep.*, **4**: 55 (2014).
16. E. V. Sudarikova, *Nerazrushayushchiy Kontrol' v Proizvodstve* [Non-Destructive Testing in Production] (Saint Petersburg: 2007) (in Russian).
17. *Kolebaniya i Volny, Optika, Atomnaya i Yadernaya Fizika: Ehlementarnyy Uchebnik Fiziki* [Oscillations and Waves, Optics, Atomic and Nuclear Physics: Elementary Physics Textbook] (Ed. G. S. Lansberg) (Moskva: Nauka: 2003) (in Russian).
18. A. M. Afonin, *Fizicheskie Osnovy Mekhaniki* [Physical Foundations of Mechanics] (Moskva: Izdatel'stvo MGTU im. Baumana: 2006) (in Russian).
19. J. Ziman, *Printsipy Teorii Tverdogo Tela* [Principles of the Theory of Solids] (Moskva: Mir: 1966) (Russian translation).
20. L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Teoriya Uprugosti* [Theory of Elasticity] (Moskva: Nauka: 1965) (in Russian).
21. A. M. Kosevich, *Osnovy Mekhaniki Kristallicheskoy Reshetki* [Fundamentals of Crystal Lattice Mechanics] (Moskva: Nauka: 1972) (in Russian).
22. J. A. Reissland, *Fizika Fononov* [The Physics of Phonons] (Moskva: Mir: 1975) (Russian translation).
23. I. Kh. Badamshin, *Ot Chetyrekh k Odnomu. Sily Vnutrennego Vzaimodeystviya i Prochnost' Materialov* [From Four to One. Internal Interaction Forces and Material Strength] (Moskva: Izdatel'skiy Dom Akademii: 2016) (in Russian).
24. P. Yu. Volosevych, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **16**: 1179 (1997) (in Russian).
25. I. Ya. Perlin and M. Z. Ermanok, *Teoriya Volocheniya* [Theory of Bragging] (Moskva: Metallurgiya: 1971) (in Russian).
26. N. N. Davidenkov and N. I. Spiridonova, *Zavodskaya Laboratoriya*, No. 11: 583 (1945) (in Russian).
27. V. I. Reznikov and V. M. Segal, *Problemy Prochnosti*, No. 1: 78 (1980) (in Russian).
28. P. Yu. Volosevych and T. N. Serditova, *Poroshkovaya Metallurgiya*, No. 5: 67 (1988) (in Russian).
29. P. Yu. Volosevych, V. A. Moskalenko, T. N. Serditova, and V. I. Eremin, *Metallofizika*, **8**, No. 3: 111 (1986) (in Russian).
30. P. Yu. Volosevych, Yu. Ya. Meshkov, and T. N. Serditova, *Metallofizika*, **7**, No. 3: 93 (1985) (in Russian).
31. S. A. Firstov, *Progressivnyye Materialy i Tekhnologii* [Progressive Materials and Technologies] (Kiev: 2003), vol. 2, p. 610 (in Russian).
32. V. I. Trefilov, V. F. Moiseev, E. P. Pechkovskiy, I. D. Gornaya, and A. D. Vasil'ev, *Deformatsionnoye Uprochnenie i Razrushenie Polikristallicheskikh Metallov* [Strain Hardening and Fracture of Polycrystalline Metals]

- (Kiev: Naukova Dumka: 1979) (in Russian).
33. D. McLean, *Mekhanicheskie Svoistva Metallov* [Mechanical Properties of Metals] (Moskva: Metallurgiya: 1965) (Russian translation).
34. R. Berner and H. Kronmuller, *Plasticheskaya Deformatsiya Monokristallov* [Plastic Deformation of Single Crystals] (Moskva: Mir: 1969) (Russian translation).
35. V. I. Trefilov, Yu. V. Mil'man, and S. A. Firstov, *Fizicheskie Osnovy Prochnosti Tugoplavkikh Metallov* [Physical Principles of Strength of Refractory Metals] (Kiev: Naukova Dumka: 1975) (in Russian).
36. T. Yokobori, *Nauchnye Osnovy Prochnosti i Razrusheniia Materialov* [Scientific Principles of Strength and Fracture of Materials] (Kiev: Naukova Dumka: 1978) (Russian translation).
37. J. F. Knott, *Osnovy Mekhaniki Razrusheniya* [Fundamentals of Fracture Mechanics] (Moskva: Metallurgiya: 1978) (Russian translation).
38. O. N. Romaniv, *Vyazkost' Razrusheniya Konstruktsionnykh Staley* [Fracture Toughness of Structural Steels] (Moskva: Metallurgiya: 1979) (in Russian).
39. V. T. Troshchenko, *Deformirovanie i Razrushenie Metallov pri Mnogotsiklovom Nagruzhении* [Deformation and Fracture of Metals under Multiple-Cycle Loading] (Kiev: Naukova Dumka: 1981) (in Russian).
40. R. W. K. Honeycombe, *Plasticheskaya Deformatsiya Metallov* [The Plastic Deformation of Metals] (Moskva: Mir: 1972) (Russian translation).
41. V. P. Alekhin, *Fizika Prochnosti i Plastichnosti Poverkhnostnykh Sloev Materialov* [Physics of Strength and Plasticity of Surface Layers of Materials] (Moskva: Nauka: 1983) (in Russian).
42. V. S. Ivanova and V. F. Terent'ev, *Fizika i Khimiya Obrabotki Materialov*, **1**: 79 (1970) (in Russian).
43. V. S. Ivanova, V. F. Terent'ev, and V. G. Poyda, *Metallofizika*, No. 43: 63 (1972) (in Russian).
44. V. F. Terent'ev, *Uсталост' Metallicheskiikh Materialov* [Fatigue of Metallic Materials] (Moskva: Nauka: 2003) (in Russian).
45. P. Yu. Volosevych, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **18**, No. 10: 63 (1996) (in Russian).
46. I. V. Gavrilin, *Metallurgiya Mashinostroyeniya*, No. 4: 10 (2002) (in Russian).
47. I. V. Gavrilin, *Plavlenie i Kristallizatsiya Metallov i Splavov* [Melting and Crystallization of Metals and Alloys] (Vladimir: VIGU: 2000) (in Russian).
48. S. V. Dmitrieva, A. A. Ovcharov, M. D. Starostenkov, and Eh. V. Kozlov, *Fizika Tverdogo Tela*, **38**, No. 6: 1805 (1996) (in Russian).
49. Yu. Ya. Meshkov, A. V. Shyyan, and O. V. Zatsarna, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**, No. 7: 1029 (2020) (in Ukrainian).
50. S. A. Kotrechko, A. V. Filatov, and A. V. Ovsyannikov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **29**, No. 1: 115 (2007) (in Russian).
51. L. B. Zuev, S. A. Barannikova, and A. G. Lunev, *Usp. Fiz. Met.*, **19**, No. 4: 379 (2018) (in Russian).
52. V. E. Panin, V. E. Egorushkin, A. V. Panin, and A. G. Chernyavskiy, *Fizicheskaya Mezomekhanika*, **19**, No. 1: 31 (2016) (in Russian).
53. S. Schönecker, X. Li, B. Johansson, S. K. Kwon, and L. Vitos, *Sci. Rep.*, **5**: 14860 (2015).
54. A. Patra, J. E. Bates, J. Sun, and J. P. Perdew, *PNAS*, **114**: E9188 (2017).