

ПЕРВИЧНЫЕ НАНОТРЕЩИНЫ В НИТРИДАХ, БОРИДАХ И КАРБИДАХ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ

В.М. Юров¹, В.И. Гончаренко², В.С. Олешко²

¹НАО «Карагандинский технический университет им. А. Сагинова»

100056, Республика Казахстан, Караганда, ул. Назарбаева, 56

²ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

125993, Россия, Москва, Волоколамское шоссе, 4, А-80

exciton@list.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.328

Аннотация: Предлагается модель, по которой можно вычислить длину нанотрещины твердого тела. Длина нанотрещины в нитридах, боридах и карбидах тугоплавких металлов оказалась равной в интервале $1 < L < 3$ нм. Обсуждаются теоретические и экспериментальные методы исследования нанотрещин. Теория дает интервал длин для поликристаллов кремния $0 < L < 2$ нм. Рентгеновские и электронно-микроскопические методы дают толщину трещин в металле в диапазоне десятых и сотых долей микрона. Предложенный недавно метод фрактолюминесценции для разрушения минералов с длительность сигналов ≈ 50 нс, а интервал времени между ними изменялся от $\approx 0,1$ до 1 мкс, позволил выявить нанотрещины в олигоклазе при разрушении его поверхности в интервале $10 < L < 20$ нм, что совпадает с предложенной нами моделью. Можно привести еще примеры образования нанотрещин в твердых телах. Иными словами, мы предлагаем назвать направление физики конденсированного состояния «физикой нанотрещин», которая отличается от «теории трещин» как по ее экспериментальному обнаружению, так и методу ее расчета.

Ключевые слова: нанотрещина, поверхностный слой, металл, разрушение, поверхность, модель, микрон.

1. Введение

Поверхностный слой твердого тела представляет собой структуру, свойства которой отличны от свойств остального объема [1]. Именно этот слой приводит к разрушению металлов и конструкционных материалов за счет внешней среды посредством эффекта Ребиндера [2]. Нами предложена модель, по которой количественно можно определить величину $R(I)$ этого поверхностного слоя [3] и его анизотропию [4]. Для чистых металлов она оказалась равной от 1 до 4 нм, т.е. представляет собой наноструктуру. Экспериментально слой $R(I)$ можно определить в сверхвысоком вакууме рентгеновскими методами (для германия – $R(I) = 3,1$ нм, для золота – $R(I) = 1,2$ нм) [5]. В слое $R(I)$ происходит реконструкция или релаксация поверхности твердого тела [5]. Из-за этого возникают напряжения, приводящие к возникновению дислокаций, дефектов упаковки и т.д. и, следовательно, нанотрещин, длину которых мы сопоставим с $R(I)$, т.е. $L = R(I)$.

В настоящей работе мы определим длину нанотрещин (и сравним ее с теоретическими представлениями Гриффитса) нитридов, карбидов и

боридов «большой четверки» ниобия, тантала, молибдена, вольфрама тугоплавких металлов [6], а также их свойства и методы их упрочнения на основе наноструктуры их поверхностного слоя.

2. Описание модели

Мы будем использовать наши работы [3, 4]:

$$L = R(I) = 0,17 \cdot 10^{-9} \nu. \quad (1)$$

В уравнении (1) нужно знать один параметр – молярный объем элемента металла или соединения, который равен $\nu = M / \rho$ (M – молярная масса, ρ – ее плотность).

В работе [7] показано, что поверхностная энергия объемного металла γ_2 с точностью до 3% равна:

$$\gamma_2 = 0,7 \cdot 10^{-3} \cdot T_m, \quad (2)$$

где T_m – температура плавления элемента (К).

В слое $R(I)$ нужно учесть размерный эффект, и поверхностная энергия слоя $R(I)$ (поверхностное натяжение) становится равной γ_1 [4]:

$$\gamma_1 = \gamma_2 \left[\frac{1 - R(I)/(R(I) + r)}{1 - R(I)/r} \right] \approx 0,3\gamma_2, \quad (3)$$

где $\left[\frac{1 - R(I)/r}{1 - R(I)/(R(I) + r)} \right] \approx 1$ при $r \gg R(I)$, а $\left[\frac{1 - R(I)/r}{1 - R(I)/(R(I) + r)} \right] \approx 0,3$ при среднем значении $r = R(I)/2$.

Уравнение (3) показывает, что поверхностная энергия слоя $R(I)$ в три раза меньше поверхностной энергии основного кристалла, что совпадает с эффектом Ребиндера [2] и отвечает обратному эффекту Холла-Петча.

Чтобы разделить слой $R(I)$ от остального кристалла, нужно затратить энергию, которая называется энергией адгезии и дается выражением Дюпре [8]:

$$W_a = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \approx \gamma_1 + \gamma_2 = 1,3\gamma_2, \quad (4)$$

где γ_{12} – поверхностная энергия на границе раздела фаз, которая пренебрежимо мала, в силу фазового перехода II рода [4, 9].

Внутренние напряжения σ_{is} между фазами γ_1 и γ_2 можно просчитать по формуле [8]:

$$\sigma_{is} = \sqrt{[W_a / R(I)] \cdot E}, \quad (5)$$

где E – модуль упругости Юнга.

3. Результаты расчета и их обсуждение

По формулам (1)-(5), и учитывая сведения по тугоплавким металлам [10], вычислим необходимые данные и представим их в Таблице 1. Размер поверхностного слоя $R(I)$ порядка 2 нм. Число в скобках – это число атомных монослоев $n = R(I)/a$ (a – постоянная решетки), что

соответствует 5-8 слоев. В [11] показано, что при размерах поверхностного слоя менее 6-8 слоев энергия квантовых состояний изменяется ступенчатым способом. Причем каждой ступеньке относят соответствующие квантовые состояния. Этот монослой мы сопоставим с барьером Пайерлса – Набарро, который равен силе межатомного взаимодействия [12, 13].

Таблица 1. Толщина поверхностного слоя и длина нанотрещин $R(I)=L$, работа адгезии W_a , модуль Юнга E , величины внутренних напряжений σ_{is} , длина нанотрещин по Гриффитсу $L(G)$.

| Кристалл | $R(I) = L$, нм | W_a , Дж/м ² | E , ГПа | σ_{is} , МПа | $L(G)$, нм |
|------------------------|-----------------|---------------------------|-----------|---------------------|-------------|
| <i>Nb</i> | 1,84 (6) | 2,851 | 105 | 12767 | 1,51 |
| <i>NbN</i> | 1,52 (3) | 2,960 | 480 | 30578 | 1,17 |
| <i>NbB₂</i> | 2,79 (9) | 3,404 | 650 | 28160 | 2,33 |
| <i>NbC</i> | 2,28 (5) | 4,340 | 452 | 29326 | 1,83 |
| <i>Ta</i> | 1,85 (6) | 3,421 | 186 | 18547 | 1,54 |
| <i>TaN</i> | 2,03 (4) | 3,497 | 575 | 31480 | 1,69 |
| <i>TaB₂</i> | 2,76 (8) | 3,612 | 700 | 30315 | 2,30 |
| <i>TaC</i> | 2,27 (5) | 4,319 | 515 | 30281 | 1,92 |
| <i>Mo</i> | 1,60 (5) | 3,012 | 265 | 22316 | 1,33 |
| <i>MoB</i> | 2,07 (7) | 2,551 | 389 | 21886 | 1,76 |
| <i>MoC</i> | 2,09 (7) | 3,092 | 544 | 28373 | 1,78 |
| <i>W</i> | 1,62 (5) | 3,695 | 411 | 30611 | 1,35 |
| <i>WB</i> | 2,10 (7) | 3,321 | 496 | 28000 | 1,82 |
| <i>WC</i> | 2,11 (7) | 3,175 | 710 | 32680 | 1,84 |

В отличие от модели Френкеля-Конторовой [14], а также подходов работ [15, 16] и ряда других, мы предложим модель, по которой можно сделать оценку барьера $F(0, I, II)_{P-N}$ Пайерлса – Набарро:

$$\begin{aligned}
 F(0, I, II)_{P-N} &= \gamma_1 \cdot R(I) / n = \gamma_1 \cdot a = 3 \cdot 10^{-4} T_m \cdot a, \\
 \sigma(I)_{P-N} &= F(I)_{P-N} / S = 3 \cdot 10^{-4} T_m / a = E \cdot \varepsilon(I), \quad F(0)_{P-N} = \gamma_2 \cdot a = 7,8 \cdot 10^{-4} T_m \cdot a, \\
 \sigma(0)_{P-N} &= F(0) / S = 7,8 \cdot 10^{-4} T_m / a = E \cdot \varepsilon(0),
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

где T_m – температура плавления, a – постоянная решетки, S – площадь барьера (a^2), $\sigma(I)_{P-N}$, $\sigma(0)_{P-N}$ – напряжения Пайерлса – Набарро, E – модуль Юнга, ε представляет собой относительное удлинение параметра решётки в направлении действия внешней силы F .

Соотношение (6) показывает (для кубических решеток, для остальных см. [4]), что барьер Пайерлса – Набарро в слое $R(I)$ и далее полностью определяется экспериментально определяемыми величинами и представлен в Таблице 2. Для слоя $R(II) \approx 10R(I)$ (см. [3, 4]), где наблюдается еще наноструктура слоя и происходят размерные эффекты: $F(II) = F(0)(1 - R(I)/z)$, где z – координата, перпендикулярная плоскости образца. $F(0)$ – барьер Пайерлса – Набарро в основном веществе кристалла

и почти в 3 раза больший $F(I)$. В уравнение (6) можно добавить член $\sin(2\pi z/a)$ и показать рельеф барьера Пайерлса – Набарро [12-16].

Величина внутренних напряжений σ_{is} в Таблице 1 для металлов Nb и Ta ниже нитридов, боридов и карбидов, а для металлов Mo и W она слабо отличается от последних. Эти внутренние напряжения σ_{is} приводят к напряжениям Пайерлса – формула (6) и в соответствии с законом Гука к относительному изменению параметра кристаллической решетки ε за счет релаксации поверхности (см. Таблицу 2). Эти внутренние напряжения σ_{is} приводят к появлению источника дислокаций типа Франка-Рида [17]. По этой модели дислокация ведет себя как упругая нить (нанотрещина) и изгибается за счет внутренних напряжений $\sigma_{is} = G/bL$ (где G – модуль сдвига, b – вектор Бюргерса (равное межатомному расстоянию), L – длина дислокации (нанотрешины)). Для вольфрама имеем $G = 16,1 \cdot 10^{10}$ Па [10], $b = 3,160 \cdot 10^{-10}$ м [10], $L = 1,62 \cdot 10^{-9}$ м (см. Таблицу 1). В результате $\sigma_{is} = 31405$ МПа вместо 30611 МПа из Таблицы 1, что отличается незначительно. Значит, модель Франка-Рида может быть источником дислокаций тугоплавких металлов. В работе [18] был дан обстоятельный анализ теории Гриффитса. Для длины трещины он получил выражение:

$$L(G) = 2(\gamma_1 + \gamma_2) \cdot E / \pi \sigma_{is}^2. \quad (7)$$

Таблица 2. Температура плавления T_m , поверхностная энергия (поверхностное натяжение) γ_1 , барьер Пайерлса – Набарро $F(I)_{P-N}$, напряжение Пайерлса – Набарро $\sigma(I)_{P-N}$, относительное удлинение ε .

| Кристалл | T_m , К | γ_1 , мДж/м ² | $F(I)_{P-N}$, 10 ⁻⁹ Н | $\sigma(I)_{P-N}$, МПа | ε |
|------------------------|-----------|---------------------------------|-----------------------------------|-------------------------|---------------|
| <i>Nb</i> | 2741 | 712,7 | 0,2714 | 2492 | 0,024 |
| <i>NbN</i> | 2846 | 740,0 | 0,3774 | 1932 | 0,004 |
| <i>NbB₂</i> | 3273 | 851,0 | 0,3030 | 3182 | 0,005 |
| <i>NbC</i> | 4173 | 1085,0 | 0,5582 | 2808 | 0,006 |
| <i>Ta</i> | 3290 | 855,4 | 0,3267 | 2982 | 0,016 |
| <i>TaN</i> | 3363 | 874,4 | 0,3077 | 3308 | 0,006 |
| <i>TaB₂</i> | 3473 | 903,0 | 0,3595 | 3020 | 0,004 |
| <i>TaC</i> | 4163 | 1082,4 | 0,5565 | 2803 | 0,005 |
| <i>Mo</i> | 2896 | 753,0 | 0,2734 | 2761 | 0,010 |
| <i>MoB</i> | 2453 | 637,8 | 0,2279 | 2366 | 0,004 |
| <i>MoC</i> | 2973 | 773,0 | 0,2587 | 3076 | 0,006 |
| <i>W</i> | 3695 | 960,7 | 0,3503 | 3508 | 0,009 |
| <i>WB</i> | 3193 | 830,2 | 0,2970 | 3090 | 0,006 |
| <i>WC</i> | 3053 | 793,8 | 0,2656 | 3158 | 0,004 |

Вычисленные значения $L(G)$, представленные в Таблице 1, показывают незначительное различие между значениями, полученными по формуле (7) и формуле (1): $L(G) \approx L = R(I)$. Это говорит о справедливости

нашей модели (и теории Гриффитса). Для металлов, как мы указывали выше и в Таблице 1, длина нанотрещин находится в интервале $1 \leq L \leq 4$ нм. Теоретически длина нанотрещин определялась в работах [19, 20, 21]. В этих работах использовались модели, основанные на механике деформируемого конденсированного состояния и физики твердого тела. В основном использовались поликристаллические кристаллы кремния и карбида кремния. В моделях размер нанотрещин получен в интервале $0 \leq L \leq 2$, что соответствует нашей модели. В [22] проведено экспериментальное исследование некоторых металлов (см. Таблицу 3).

Таблица 3. Длина микротрещин [22].

| Материал | L, мкм | |
|-------------------|---------------------|-----------------------------------|
| | Рентгеновский метод | Электронно-микроскопический метод |
| <i>Al</i> | 0,14 | 0,2 |
| <i>Ni</i> | 0,08 | 0,1 |
| <i>Pt, Au, Ag</i> | – | 0,2 |
| <i>Cu, Zn</i> | – | 0,25 |
| <i>Be</i> | 0,12 | – |
| <i>Mo</i> | – | 0,08 |

Из Таблицы 3 видно, что оба метода дают значения длин трещин на уровне сотых и десятых долей микрон и на один или два порядка превышают значения из Таблицы 1. Это означает, что первичные трещины металлов из Таблицы 1 подросли за время эксперимента с рентгеновскими и электронно-микроскопическими методами. Если учесть размер нанотрещин (см. Таблицу 1), то их образование должно происходить за несколько наносекунд. Именно этот подход недавно продемонстрировано в работах [23, 24]. Этот метод основан на фрактолюминесценции, когда в процессе разрушения твердого тела возникает сигнал света (люминесценция) при разрыве атомных связей на поверхности нанотрещин с временным разрешением от 1 до 2 нс. В [24] получен спектр фрактолюминесценции олигоклаза при разрушении его поверхности. Длительность сигналов – ≈ 50 нс, а интервал времени между ними изменялся от $\approx 0,1$ до 1 мкс. Спектр содержал 4 максимума, которые возникали при преодолении 4 барьеров дислокациями по плоскостям скольжения. В этом случае дислокации образуют первичные трещины размером примерно от 10 до 20 нм. Олигоклаз представляет собой смесь из 10-30% анортита $CaAl_2Si_2O_8$ и 70-90% альбита $NaAlSi_3O_8$. Расчет по формуле (1) дал $L = 16,8-17,2$ нм, что неплохо согласуется с экспериментом. В [23] исследовался кристалл кварцевого диорита методом фрактолюминесценции и обнаружены нанотрещины размером 36; 18; 10 нм. Расчет по формуле (1) дал $L = 8-20$ нм, что также неплохо согласуется с экспериментом.

Таким образом, по формуле (1) вычисляется длина нанотрещин в слое $R(I)$, которые прорастают в металле через $\approx 50-100$ нс до размером более $10R(I)$, причем наблюдается разброс по длинам нанотрещин.

Атомарный механизм зарождения нанотрещин качественно одинаков при хрупком и вязком разрушении, поэтому рассмотрим механизм упрочнения слоя $R(I)$. Поскольку для разрушения твердого тела необходим процесс образования, накопления, объединения и роста нанотрещин, который происходит, в основном, за счет дислокаций, то необходимо затормозит их движение. В [25] проведен сравнительный анализ поведения нанотрещины в чистых металлах с ОЦК, ГЦК и ГПУ типом решетки и обнаружено различное поведение металлов, зависящее от типа кристаллической структуры. Пластические свойства металлов обусловлены образованием и движением дислокаций за счет источников типа Франка-Рида и они возникают при напряжениях $\sigma(I)_{P-N}$ (см. Таблицу 2), меньше критических [12]. Различие в поведении движения дислокаций в разных металлах обусловлено характером рельефа дислокаций, приводящее к их автоблокировке в случае двухдолинного рельефа. Тормозом движения дислокаций в металлах является их легирование примесными атомами [26]. Слой $R(I)$ можно упрочнить за счет поверхностнонаноструктурирования [27]. Заметим теперь следующее: в Таблице 1 монослои тугоплавких металлов имеют значения 5-8 слоев. В 20-х годах XX столетия академик А.Ф. Иоффе провел ряд экспериментов с кристаллом $NaCl$ и он получил разрыв этой соли в размере $0,4 \text{ кг/мм}^2$ вместо 200 кг/мм^2 по теории М. Борна [28]. А.Ф. Иоффе связал это с существованием микротрещин в поверхностном слое. Затем он кристалл $NaCl$ опускал в воду и измерял твердость его поверхности, которая увеличилась при растворении поверхности, приближаясь к теоретическому значению. Этот эксперимент был назван «эффектом Иоффе» [29]. Так, для кристалла $NaCl$ по нашей модели $R(I) = 4,6 \text{ нм}$ и число монослоев $n = 8$. Нетрудно смыть водой 8 монослоев $NaCl$, чтобы получить эффект Иоффе. Чтобы снизить влияние нанотрещин за счет эффекта Иоффе в наноструктурном поверхностном слое, надо удалить несколько монослоев металла. Это достигается с применением высокоэнергетических технологий обработки поверхности, а именно: лазерные, ионные и электронные пучки [30-33].

4. Заключение

Поверхностный слой (или поверхность) толщиной $R(I)$ представляет собой открытую неравновесную систему твердого тела, ограниченного внешней средой. В этой связи, первичные нанотрещины твердого тела

следует рассматривать как начальную стадию в общем процессе эксплуатации конструкционных деталей, а его разрушение – как заключительную фазу, которая будет соответствовать ее выходу из эксплуатации. Поверхностный слой $R(I)$ представляет собой синергетическую систему, фундаментальные свойства которой подвержены саморегулированию и самоорганизации в самых различных условиях эксплуатации конструкционных деталей. Это открывает широкий путь по модификации поверхностного слоя $R(I)$, пригодного к эксплуатации деталей в условиях высокоскоростного трения, в авиации и космической техники и многое другое. Это означает, что очень важно исследовать не только поверхность и связанные с ним поверхностные явления, но и поверхностный слой, который имеет свою структуру и новые, возможно необычные, свойства.

Библиографический список:

1. **Панин, В.Е.** Наноструктурирование поверхностных слоев конструкционных материалов и нанесение наноструктурных покрытий / В.Е. Панин, В.П. Сергеев, А.В. Панин. – Томск: Изд-во ТПУ. 2010. – 254 с.
2. **Малкин, А.И.** Эффект Ребиндера в разрушении металлов и горных пород / А.И. Малкин, Д.А. Попов // Физика металлов и металловедение. – 2022. – Т. 123. – №12. – С. 1313-1324. DOI: 10.31857/S0015323022600678.
3. **Юров, В.М.** Толщина поверхностного слоя атомарно-гладких кристаллов / В.М. Юров // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 389-397. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.389.
4. **Юров, В.М.** Толщина поверхностного слоя и анизотропия поверхностной энергии кубических кристаллов рутения / В.М. Юров, В.И. Гончаренко, В.С. Олешко, С.А. Гученко // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 522-533. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.522.
5. **Оура, К.** Введение в физику поверхности / К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин и др. – М.: Наука, 2006. – 490 с.
6. **Андриевский, Р.А.** Наноматериалы на основе тугоплавких карбидов, нитридов и боридов / Р.А. Андриевский // Успехи химии. – 2005. – Т. 74. – Вып. 12. – С. 1163-1175.
7. **Рехвиашвили, С.Ш.** К расчету постоянной Толмена / С.Ш. Рехвиашвили, Е.В. Кишпикова, Р.Ю. Кармокова, А.М. Кармоков // Письма в журнал технической физики. – 2007. – Т. 33. – Вып. 2. – С. 1-7.
8. **Зимон, А.Д.** Адгезия пленок и покрытий / А.Д. Зимон. – М.: Химия, 1977. – 352 с.
9. **Yurov, V.M.** Structural phase transition in a surface layer of metals / V.M. Yurov, S.A. Guchenko, V.Ch. Laurinas, O.N. Zavatskaya // Вестник Карагандинского университета. Серия: Физика. – 2019. – № 1 (93). – Р. 50-60. DOI: 10.31489/2019Ph1/50-60.
10. **Баженов, М.Ф.** Твердые сплавы: справочник / М.Ф. Баженов, С.Г. Байчман, Д.Г. Карпачев. – М.: Металлургия, 1978. – 184 с.
11. **Шикин, А.М.** Квантово-размерные эффекты в тонких слоях металлов на поверхности монокристаллов и их анализ / А.М. Шикин, В.К. Адамчук // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50. – Вып. 6. – С. 1121-1137.
12. **Peierls, R.** The size of a dislocation / R. Peierls // Proceedings of the Physical Society. – 1940. – V. 52. – № 1. – P. 34-37. DOI: 10.1088/0959-5309/52/1/305.
13. **Nabarro, F.R.N.** Dislocations in a simple cubic lattice / F.R.N. Nabarro // Proceedings of the Physical Society. – 1947. – V. 59. – № 2. – P. 256-272. DOI: 10.1088/0959-5309/59/2/309.
14. **Усатенко, О.В.** Энергия и барьер Пайерлса дислокации (кинка) Френкеля–Конторовой / О.В. Усатенко, А.В. Горбач, А.С. Ковалев // Физика твердого тела. – 2001. – Т. 43. – Вып. 7. – С. 1202-1206.
15. **Фан, Т.** Исследование полных А-дислокаций в чистом магнии на основе первичных принципов / Т. Фан, Л. Луо, Л. Ма и др. // Прикладная механика и техническая физика. – 2014. – Т. 55. – № 4 (326).

– С. 141-151.

16. **Гринберг, Б.А.** О возможности автоблокировки дислокаций в различных материалах / Б.А. Гринберг, М.А. Иванов и др. // Физика металлов и металловедение. – 2009. – Т. 108. – №1. – С. 93-104.
17. **Благовещенский, В.В.** Исследование модели дислокационного источника Франка-Рида / В.В. Благовещенский, И.Г. Панин // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2012. – № 1. – С. 40-45.
18. **Гарбер, Р.И.** Физика прочности кристаллических тел / Р.И. Гарбер, И.А. Гиндин // Успехи физических наук. – 1960. – Т. 70. – Вып. 1. – С. 57-110.
19. **Овидько, И.А.** Зарождение нанотрещин в поликристаллическом кремнии под действием зернограничного скольжения / И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49. – Вып. 6. – С. 1056-1060.
20. **Дроздов, А.Ю.** Исследование эволюции микротрещины в модельных металлах при ионной имплантации. компьютерный эксперимент / А.Ю. Дроздов, М.А. Баранов, В.Я. Баянкин // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2004. – № 5. – С. 76-80.
21. **Морозов, Н.Ф.** Влияние зарождения цепочек наноскопических зерен вблизи вершин трещин на трещиностойкость нанокристаллических керамик / Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько, Н.В. Скиба // Доклады Академии наук. – 2013. – Т. 450. – № 4. – С. 413-416. DOI: 10.7868/S0869565213160111.
22. **Бетехтин, В.И.** Эволюция микроскопических трещин и пор в нагруженных твердых телах / В.И. Бетехтин, А.Г. Кадомцев // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47. – Вып. 5. – С. 801-807.
23. **Веттегрень, В.И.** Разрушение кварцевого диорита при трении / В.И. Веттегрень, А.В. Пономарев и др. // Геофизические исследования. – 2020. – Т. 21. – № 4. – С. 35-50. DOI: 10.21455/gr2020.4-3.
24. **Веттегрень, В.И.** Нанотрещины при разрушении олигоклаза / В.И. Веттегрень, А.В. Пономарев, В.Б. Кулик и др. // Физика земли. – 2021. – № 6. – С. 87-92. DOI: 10.311857/S0002333721060119.
25. **Букреев, К.А.** Теоретическая прочность на сдвиг ОЦК- и ГПУ-металлов / К.А. Букреев, А.М. Искандеров, С.В. Дмитриев и др. // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – Вып. 3. – С. 417-422.
26. **Карькина, Л.Е.** Влияние сегрегаций легирующих элементов на зернограничное проскальзывание в бикристаллах сплавов Al-Mg и Al-Ni. Атомистическое моделирование / Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев // Физика металлов и металловедение. – 2020. – Т. 121. – № 9. – С. 901-906. DOI: 10.31857/S001532020090077.
27. **Макарова, А.В.** Металлофизические основы наноструктурирующей фрикционной обработки сталей / А.В. Макарова, Л.Г. Коршунова // Физика металлов и металловедение. – 2019. – Т. 120. – № 3. – С. 327-336. DOI: 10.1134/S0015323018120124.
28. **Иоффе, А.Ф.** Отчет о работе физико-технического института / А.Ф. Иоффе // Успехи физических наук. – 1936. – Т. 16. – Вып. 7. – С. 848-871. DOI: 10.3367/UFNr.0016.193607c.0847.
29. **Френкель, В.Я.** Абрам Федорович Иоффе (Биографический очерк) / В.Я. Френкель // Успехи физических наук. – 1980. – Т. 132. – Вып. 9. – С. 11-45. DOI: 10.3367/UFNr.0132.198009b.0011.
30. **Чаус, А.С.** Формирование структуры быстрорежущей стали при лазерном оплавлении поверхности / А.С. Чаус, А.В. Максименко и др. // Физика металлов и металловедение. – 2019. – Т. 120. – № 3. – С. 291-300. DOI: 10.1134/S0015323019030045.
31. **Ботвина, Л.Р.** Иерархия микротрещин при циклическом и статическом нагружении / Л.Р. Ботвина, А.И. Болотников, И.О. Синев // Физическая мезомеханика. – 2019. – Т. 22. – № 6. – С. 24-36. DOI: 10.24411/1683-805X-2019-16003.
32. **Трусов, П.В.** Многоуровневые модели в физической мезомеханике металлов и сплавов: результаты и перспективы / П.В. Трусов, А.И. Швейкин, Н.С. Кондратьев, А.Ю. Янц // Физическая мезомеханика. 2020. – Т. 23. – № 6. – С. 33-62. DOI: 10.24411/1683-805X-2020-16003.
33. **Федоренков, Д.И.** Методика определения констант и параметров модели накопления повреждений с изотропным и кинематическим упрочнением / Д.И. Федоренков, Д.А. Косов, А.В. Туманов // Физическая мезомеханика. – 2022. – Т. 25. – № 6. – С. 63-74. DOI: 10.55652/1683-805X202225663.

References:

1. Panin V.E., Sergeev V.P., Panin A.V. *Nanostrukturirovanie poverkhnostnykh sloev konstruktivnykh materialov i nanesenie nanostrukturnykh pokrytij* [Nanostructuring of surface layers of structural materials and application of nanostructural coatings]. Tomsk, TPU Publ., 2010, 254 p. (In Russian).
2. Malkin A.I., Popov D.A. The Rehbinder effect in fracturing of metals and rock, *Physics of Metals and Metallography*, 2022, V. 123, issue 12, pp. 1234-1244. DOI: 10.1134/S0031918X22601585.
3. Yurov V.M. Tolshchina poverkhnostnogo sloya atomarno-gladkikh kristallov [Thickness of the surface layer of atomic-smooth crystals], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov*

- [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2019, issue 11, pp. 389-397. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.389. (In Russian).
4. Yurov V.M., Goncharenko V.I., Oleshko V.S., Guchenko S.A. Tolshchina poverkhnostnogo sloya i anizotropiya poverkhnostnoj energii kubicheskikh kristallov ruteniya [Surface layer thickness and anisotropy of the surface energy of cubic ruthenium crystal], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2021, issue 13, pp. 522-533. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.522. (In Russian).
 5. Oura K., Lifshits V.G., Saranin A.A. et al. *Vvedenie v fiziku poverkhnosti* [Introduction to surface physics]. Moscow: Nauka Publ., 2006, 490 p. (In Russian).
 6. Andrievski R.A. Nanomaterials based on high-melting carbides, nitrides and borides, *Russian Chemical Reviews*, 2005, vol. 74, issue 12, pp. 1061-1072. DOI: 10.1070/RC2005v074n12ABEH001202.
 7. Rekhviashvili S.Sh., Kishtikova E.V., Karmokova R.Yu., Karmokov A.M. Calculating the Tolman constant, *Technical Physics Letters*, 2007, vol. 33, issue 1, pp. 48-50. DOI: 10.1134/S1063785007010130.
 8. Zimon A.D. *Adgeziya plenok i pokrytij* [Adhesion of films and coatings]. Moscow, Chemistry Publ., 1977, 352 p. (In Russian).
 9. Yurov V.M., Guchenko S.A., Laurinas V.Ch., Zavatskaya O.N. Structural phase transition in a surface layer of metals, *Bulletin of the Karaganda university. Physics series*, 2019, no. 1 (93), pp. 50-60. DOI 10.31489/2019Ph1/50-60.
 10. Bazhenov M.F., Baichman S.G., Karpachev D.G. *Tverdye splavy: spravochnik* [Solid alloys: a reference book]. Moscow, Metallurgy Publ., 1978, 184 p. (In Russian).
 11. Shikin A.M., Adamchuk V.K. Quantum confinement effects in thin metal layers on the surface of single crystals and their analysis, *Physics of the Solid State*, 2008, vol. 50, issue 6, pp. 1170-1185. DOI: 10.1134/S1063783408060280.
 12. Peierls R. The size of a dislocation, *Proceedings of the Physical Society*, 1940, vol. 52, no. 1, pp. 34-37. DOI: 10.1088/0959-5309/52/1/305.
 13. Nabarro F.R.N. Dislocations in a simple cubic lattice, *Proceedings of the Physical Society*, 1947, vol. 59, no. 2, pp. 256-272. DOI: 10.1088/0959-5309/59/2/309.
 14. Usatenko O.V., Gorbach A.V., Kovalev A.S. The energy and peierls barrier of a Frenkel-Kontorova dislocation (kink), *Physics of the Solid State*, 2001, vol. 43, issue 7, pp. 1247-1251. DOI: 10.1134/1.1386458.
 15. Fan T., Luo L., Tang B. et al. First-principles study of full A-dislocations in pure magnesium, *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2014, vol. 55, issue 4, pp. 672-681. DOI: 10.1134/S0021894414040130.
 16. Greenberg B.A., Ivanov M.A. et al. On the possibility of the self-blocking of dislocations in various materials, *The Physics of Metals and Metallography*, 2009, vol. 108, issue 1, pp. 88-99. DOI: 10.1134/S0031918X09070114.
 17. Blagoveschensky V.V., Panin I.G. Issledovanie modeli dislokatsionnogo istochnika Franka-Rida [Study of Frank-Read dislocation source model], *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki* [Materials of Electronics Engineering], 2012, no. 1, pp. 40-45. (In Russian).
 18. Garber R.I., Gindin I.A. Physics of the strength of crystalline materials, *Soviet Physics Uspekhi*, 1960, vol. 3, issue 1, pp. 41-77. DOI: 10.1070/PU1960v003n01ABEH003258.
 19. Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Nanocrack nucleation in polycrystalline silicon during grain-boundary sliding, *Physics of the Solid State*, 2007, vol. 49, issue 6, pp. 1111-1115. DOI: 10.1134/S1063783407060157.
 20. Drozdov A. Yu., Baranov M.A., Bayankin V. Ya. Investigation of a microcrack evolution in model metals under ion implantation. Computer simulation, *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i nejtronnye issledovaniya* [Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques], 2004, no. 5, pp. 76-80. (In Russian).
 21. Morozov N.F., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Influence of nucleation of the chains of nanoscopic grains near the vertexes of cracks on the crack resistance of nanocrystalline ceramics, *Doklady Physics*, 2013, vol. 58, issue 6, pp. 249-252. DOI: 10.1134/S1028335813060049.
 22. Betekhtin V.I., Kadomtsev A.G. Evolution of microscopic cracks and pores in solids under loading, *Physics of the Solid State*, 2005, vol. 47, issue 5, pp. 825-831. DOI: 10.1134/1.1924839.
 23. Vettegren V.I., Ponomarev A.V. et al. Razrushenie kvartsevo go diorita pri trenii [Destruction of quartz diorite at friction], *Geophysical Research*, 2020, vol. 21, no. 4, pp. 35-50 DOI: 10.21455/gr2020.4-3 (In Russian).
 24. Vettegren V.I., Ponomarev A.V., Mamalimov R.I. et al. Nanocracks upon fracture of oligoclase, *Izvestiya, Physics of the Solid Earth*, 2021, vol. 57, issue 6, pp. 894-899. DOI: 10.1134/S1069351321060112.
 25. Bukreeva K.A., Iskandarov A.M., Dmitriev S.V. et al. Theoretical shear strength of fcc and hcp metals, *Physics of the Solid State*, 2014, vol. 56, issue 3, pp. 423-428. DOI: 10.1134/S1063783414030081.
 26. Kar'kina L.E., Kar'kin I.N., Gornostyrev Y.N. Effect of alloying element segregations on the grain boundary

- sliding in Al-Mg and Al-Ni alloy bicrystals: atomistic modeling, *The Physics of Metals and Metallography*, 2020, vol. 121, issue 9, pp. 817-822. DOI: 10.1134/S0031918X20090070.
27. Makarov A.V., Korshunov L.G. Metallophysical foundations of nanostructuring frictional treatment of steels, *The Physics of Metals and Metallography*, 2019, vol. 120, issue 3, pp. 303-311. DOI: 10.1134/S0031918X18120128.
28. Ioffe A.F. Otchet o rabote fiziko-tehnicheskogo instituta [Report on the work of the Physics and Technology Institute], *Soviet Physics Uspekhi*, 1936, vol. 16, issue 7, pp. 848-871. DOI: 10.3367/UFNr.0016.193607c.0847. (In Russian).
29. Frenkel' V.Ya. Abram Fedorovich Ioffe (Biographical sketch), *Soviet Physics Uspekhi*, 1980, vol. 23, issue 9, pp. 531-550. DOI: 10.1070/PU1980v023n09ABEH005854.
30. Chaus A.S., Čaplovič E. et al. Formation of structure of a high-speed steel upon laser surface melting, *The Physics of Metals and Metallography*, 2019, vol. 120, issue 3, pp. 269-277. DOI: 10.1134/S0031918X19030049.
31. Botvina L.R., Bolotnikov A.I., Sinev I.O. Hierarchy of microcracks under cyclic and static loads, *Physical Mesomechanics*, 2020, vol. 23, issue 6, pp. 466-476. DOI: 10.1134/S1029959920060028.
32. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratyev N.S., Yants A.Yu. Multilevel models in physical mesomechanics of metals and alloys: results and prospects, *Physical Mesomechanics*, 2020, vol. 24, issue 4, pp. 391-417. DOI: 10.1134/S1029959921040056.
33. Fedorenko D.I., Kosov D.A., Tumanov A.V. A method of determining the constants and parameters of a damage accumulation model with isotropic and kinematic hardening, *Physical Mesomechanics*, 2023, vol. 26, issue 2, pp. 157-166. DOI: 10.1134/S1029959923020054.

Original paper

PRIMARY NANOCRACKS IN NITRIDES, BORIDES, AND CARBIDES OF REFRACTORY METALS

V.M. Yurov¹, V.I. Goncharenko², V.S. Oleshko²

¹*Karaganda Technical University named after A. Saginov, Karaganda, Republic of Kazakhstan*

²*Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia*

DOI:10.26456/pcascnn/2023.15.328

Abstract: A model is proposed that can be used to calculate the length of a nanocrack in a solid body. The nanocrack length in nitrides, borides, and carbides of refractory metals turned out to be in the range $1 < L < 3$ nm. Theoretical and experimental methods for studying nanocracks are discussed. The theory gives a length interval $0 < L < 2$ nm for silicon polycrystals. X-ray and electron microscopic methods give the thickness of cracks in the metal in the range of tenths and hundredths of a micron. The recently proposed method of fractoluminescence for the destruction of minerals with a duration of signals of about 50 ns, and the time interval between them varied from about 0,1 to 1 μ s, made it possible to reveal nanocracks in oligoclase during the destruction of its surface in the range of $10 < L < 20$ nm, which coincides with the one in proposed by us model. More examples of the formation of nanocracks in solids can be cited. In other words, we propose to call the direction of condensed matter physics «physics of nanocracks», which differs from the «theory of cracks» both in its experimental detection and in the method of its calculation.

Keywords: nanocrack, surface layer, metal, fracture, surface, model, micron.

Юров Виктор Михайлович – к.ф.-м.н., доцент кафедры «Месторождения полезных ископаемых», НАО «Карагандинский технический университет им. А. Сагинова»

Гончаренко Владимир Иванович – д.т.н., доцент, директор Военного института МАИ, ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Олешко Владимир Станиславович – к.т.н., доцент, начальник кафедры летательных аппаратов Военного института МАИ, ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Viktor M. Yurov – Ph.D., Associate Professor, Deposits of minerals Department, Karaganda Technical University named after A. Saginov

Vladimir I. Goncharenko – Dr. Sc., Associate Professor, Director of the Military Institute MAI, Moscow Aviation Institute (National Research University)

Vladimir S. Oleshko – Ph. D., Associate Professor, Head of the Aircraft Department of the Military Institute MAI, Moscow Aviation Institute (National Research University)

Поступила в редакцию/received: 17.06.2023; после рецензирования/reviced: 02.07.2023; принята/accepted: 09.07.2023.