

ТЕОРЕТИЧНА МІЦНІСТЬ ТВЕРДИХ ТІЛ: ОСТАННІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЗАСТОСУВАННЯ

Я. ПОКЛУДА

Технологічний університет у м. Брно, Чеська Республіка

Подано результати останніх досягнень з атомістичних обчислень теоретичної (ідеальної) міцності твердих тіл (кристалів) з акцентом на неемпіричні (ab initio) підходи до синтезу теоретичних і експериментальних даних. Показано, що свої характеристики в'язкості руйнування (крихкості) полікристалічні матеріали частково успадковують від матриць їх ідеальних кристалів. З іншого боку, реакція ідеальних металевих кристалів на тривісний розтяг виражена через критичну деформацію, що якісно відмінна для інженерних матеріалів. Це пояснюють ростом пластичності та об'єднанням мікропустот на частинках вторинних фаз за тривісного розтягу. Теоретична міцність (ТМ), обчислена за неемпіричним (ab initio) та молекулярно-динамічним методами, наближається до експериментальних значень.

Ключові слова: *теоретична міцність, деформація, дислокації, кристали, великомасштабні моделі, методи обчислення ТМ.*

Ідеальні кристали моделюють реальні монокристали, хоч останні завжди містять дефекти [1], зокрема, деяке скупчення пустот неминуче навіть у ниткоподібних кристалах. Механічні характеристики ідеальних кристалів можна успішно моделювати та прогнозувати їх стан за допомогою неемпіричних (ab initio) підходів на основі розрахунку електронної структури, які охоплюють найсучасніші точні методи обчислення. Хоча багато кристалографічних, пружних, електричних, магнетних та термодинамічних характеристик не залежать від дефектів кристалів, неемпіричні (ab initio) результати все ж можна підтвердити експериментально. Наукова та практична цінність таких досліджень полягає у тому, що вдається виявити роль дефектів за різницею значень механічних параметрів ідеальних та реальних кристалів. Теоретична міцність (ТМ) – верхня межа міцності твердих тіл. Отже, інженери можуть виявити різницю між міцністю сучасних високоміцних матеріалів та ТМ, що важливо у фундаментальній теорії руйнування матеріалів. Наприклад, напруження, необхідне для зародження однорідних (на ґратці) та неоднорідних (на межі зерен) дислокацій, можна визначити за значенням ТМ за зсуву, а напруження, необхідні для зародження тріщин нормального відриву, повинні досягати значень ТМ за розтягу. Співвідношення цих величин свідчить про схильність матриці кристала до крихкого чи в'язкого руйнування. Характеристики ідеальних кристалів можна використовувати у великомасштабних моделях (макромоделях) процесів деформування та руйнування інженерних матеріалів, щоб зміцнити нові композитні, а також керамічні матеріали, що важливо для спеціальних елементів конструкцій, наприклад, лопаток турбін [2].

Принципи обчислень теоретичної міцності, отриманих в останні роки. Напружений стан для конкретного типу навантаження описують шістьма компонентами тензора напружень, тому існує теоретично нескінченне число значень ТМ для певного кристала. ТМ зазвичай оцінювали для кількох певних типів на-

вантаження, кожен з яких залежить від одного компонента тензора напружень: одновісного розтягу та стиску вздовж різних кристалографічних напрямків, ізотропного (гідростатичного) розтягу та стиску, а також чистого зсуву у вибраних площинах та напрямках. Значення ТМ для таких видів навантаження позначимо як σ_{ut} , σ_{uc} , σ_{ht} , σ_{hc} та τ_s . Відповідні підходи для обчислень ТМ кристалів описані раніше [1, 3–8].

Деякі значення теоретичної міцності кристалів за особливих типів навантаження. Теоретичні обчислення ТМ з'явилися у 80-ті роки минулого століття. У них використовували теорію функціоналу густини [9], за якою знаходження руху багатьох взаємодіючих електронів зводило до вивчення руху єдиного електрона в ефективному функціоналі. У праці [10], досліджуючи деформацію міді, вперше вивчили ідеальну міцність кристала σ_{ut} за його одновісного розтягу. Однак не враховували релаксації (зменшення) розмірів навантажених кристалів у напрямках, перпендикулярних до осі навантаження (пуассонівський тип розширення чи звуження). Пізніше значення σ_{ut} для кількох різних осей навантаження обчислили в праці [11]. У публікаціях [12, 13] повністю релаксували поперечні напруження, включно з пуассонівським звуженням, для багатьох матеріалів з гранецентрованою (ГЦК) та об'ємноцентрованою (ОЦК) кубічними ґратками. Кристали з ГЦК ґраткою володіли найнижчими значеннями максимальних напружень розтягу (як і пов'язана з ними деформація) під навантаженням вздовж напрямку $\langle 110 \rangle$ і найвищими – вздовж напрямку $\langle 100 \rangle$. Протилежна тенденція була для кристалів з ОЦК ґраткою: найвищі значення міцності за розтягу відповідали напрямку $\langle 110 \rangle$, а найнижчі – напрямку $\langle 100 \rangle$. Такі властивості можна пояснити зміщенням фазових перетворень [13]. Наприклад, кристали з ОЦК ґраткою, деформовані у тригональному напрямку $\langle 111 \rangle$, перетворюються у просту кубічну структуру з досить високою енергією. З іншого боку, деформація вздовж напрямку $\langle 100 \rangle$ призводить до утворення кристалів з ГЦК структурою, що мають значно меншу енергію. Таким чином, максимальні напруження, а також критичні деформації у напрямку $\langle 111 \rangle$ в кристалах ГЦК ґраткою є значно вищі, ніж за розтягу у напрямку $\langle 100 \rangle$. Це є причиною того, що при низьких температурах механізм руйнування реальних ОЦК кристалів крихкий (скольний) вздовж площин $\{100\}$. Зауважимо, що деякі критерії механічної стабільності (*суцільності*), пов'язані зі зсувом, можуть бути порушені ще перед досягненням максимальних напружень. Це вже було показано для Al [14], Nb [15] та Cu [16].

Результати теоретичного обчислення міцності σ_{uc} за одновісного стиску для кристалів з ГЦК ґраткою у напрямках $\langle 100 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$ подано у працях [17, 18]. Всі досліджувані кристали мали вищі значення σ_{uc} (як і пов'язані з ними деформації) у напрямку навантаження $\langle 111 \rangle$ проти напрямку $\langle 100 \rangle$. Це можна також пояснити зміщенням фазових перетворень. Деформації у тетрагональному Бейновому напрямку $\langle 100 \rangle$ перетворюють ГЦК ґратку у симетричну ОЦК. Якщо взяти ГЦК структуру за початковий стан ($c = a = a_0$, де a – параметр ґратки у вихідному стані), то можна припустити, що тетрагональні трансформації перетворюють її у ОЦК при $a/b = \sqrt{1/2}$. Під час об'ємно-зберігальної трансформації (за одновісного розтягу) структуру ОЦК за нульового напруження стиску виявлено за деформації $e = c/a - 1 = 0,21$. Максимальне напруження можна очікувати за майже половини значення деформації, тобто коли $e_{\max,100} = -0,10$. З іншого боку, одновісний стиск вздовж тетрагонального напрямку $\langle 111 \rangle$ перетворює ГЦК ґратку у просту кубічну і, як наслідок, у структуру ОЦК. Деформація, пов'язана з цим ненапруженим станом за об'ємно-зберігальної деформації за одновісного стиску, становить $-0,37$, а максимальне напруження з'явиться при $e_{\max,111} = -0,18$. Оскільки $|e_{\max,111}| > |e_{\max,100}|$, то подібна нерівність $\sigma_{uc,111} > \sigma_{uc,100}$ справдиться для відпо-

відних міцностей за стиску. Знайдене відношення теоретичної міцності за розтягу $\sigma_{uc,111}$ до відповідного модуля Юнга було в межах $0,10 \div 0,14$ (за винятком Іг), що відповідає середньому значенню грубої оцінки за класичними підходами Поляні та Орована [1]. Відношення для нормалізованої міцності за стиску $\sigma_{uc,111}$ були дещо вищі (у більшості перевищують 0,15). З іншого боку, значення нормалізованої міцності $\sigma_{uc,100}$ були в межах $0,10 \div 0,14$, а для їх стискувальних частин $\sigma_{uc,100} \sim 0,05$). Подвійні значення отримані для Іг та А1, що є результатом спрямованішого міжатомного зв'язку у цих кристалах (див., напр., [19]).

Значення τ_s (теоретичної міцності кристалів на неоднорідний зсув) для багатьох металів із ГЦК та ОЦК ґратками практично одночасно обчислили Пакстон та інші [20] (нерелаксований однорідний зсув), використовуючи теоретичний підхід, та Сандера і Поклуда [21] (жорсткий зсув одного напівнескінченного півкристала) за напівемпіричними міжатомними потенціалами. Повністю релаксовані значення τ_s , що відповідають однорідному зсуву, дещо нижчі, ніж обчислені Черни та Поклудою [22–25]. Необхідно наголосити, що у всіх цих випадках всі метали мали ГЦК та ОЦК ґратки і значення $\tau_s / G \approx 0,13$ (G – модуль зсуву) залишалося майже сталим і тільки трохи перевищувало 0,1, що передбачає класична концепція Френкеля, та втричі 0,033, знайдене Маккензі для зсуву $\langle 100 \rangle \{111\}$ у металах з ГЦК ґраткою. Випадає з правил кристал платини з дуже низьким значенням 0,037, близьким до результату Маккензі, встановленим для однорідного зсуву [25]. Треба також зазначити, що принаймні для металів з ГЦК ґраткою за значенням τ_s можна доволі просто визначити міцність за одновісного розтягу [26]. Отримані значення σ_{uc} близькі до обчислених за дуже трудомісткою методикою, що враховує механічну нестабільність. Відомі [27–36] теоретичні та експериментальні значення міцності для вибраних кристалів і певних типів навантажень подані в таблиці.

Починаючи з 1997 р., теоретичну міцність за ізотропного тривісного розтягу σ_{uc} обчислювали Поклуда з групою вчених [37–39] та інші дослідники [34, 40]. Оскільки симетрія структури не змінюється під час цієї деформації, можна використовувати спрощені неемпіричні підходи, наприклад LMTO-ASA (наближення атомних сфер). Механічну стабільність кристалів за ізотропного навантаження вивчали раніше [36, 37, 41]. Виявили, що кристали Co, Cr, Fe, Cu, Ag, Ni, Ni₃Al, та NiAl руйнуються шляхом повної декогезії вздовж початкового напрямку деформації, тобто не проявляючи попередньої нестабільності зсуву, яка з'являється тільки у кристалах Al та Al₃Ni. Таким чином, значення σ_{ht} лише несуттєво зменшуються. Це означає, що за ізотропного розтягу значення σ_{ht} у точці згину можна вважати теоретичною міцністю для всіх досліджуваних кристалів.

Всі обчислені значення τ_s для кристалів із ГЦК ґраткою відповідають площині зсуву $\{111\}$, а з ОЦК – напрямку зсуву $\langle 111 \rangle$. Класифікація кристалів за їх ідеальною ізотропною міцністю за розтягу σ_{ht} майже відповідає нашим результатам про міцність кристалів з дефектами, що справедливо і для набагато більшого нагромадження кристалів (полікристалів) [1]. Це означає, що опірність руйнуванню інженерних матеріалів під навантаженням розтягу ϵ , хоча б частково, *успадкованою формою міцності* відповідних ідеальних ґраток. Експериментальні дані про ТМ досить обмежені через складність підготовки зразків та експериментального обладнання. Дуже важко, зокрема, вимірювати ТМ за гідростатичного розтягу σ_{ht} , і до сьогодні такі вимірювання не реалізовані. Це частково стосується і експериментальних значень τ_s , які в основному отримують з перерахунку результатів досліджень ниткоподібних кристалів на розтяг [30]. Однак недавно отримали деякі непрямі результати вимірювання τ_s за “стрибками” на кривій сила–зміщення, побудованими за результатами випроб шляхом *нановдавлювання*, що свідчить про добру кореляцію експериментальних та теоретичних даних. Най-

нижчі значення τ_s та σ_{ht} для конкретного кристала знаходили, враховуючи механічну чи фононову стабільність (позначену як S у таблиці). Все ж експериментальні значення, отримані для великого ідеального монокристала чи ниткоподібних кристалів за одновісного навантаження, є значно нижчі, ніж обчислені. Це, найімовірніше, зумовлено нестабільністю зсуву, спричиненого кінетикою руху дислокацій на завершальному етапі руйнування.

**Обчислені та експериментальні значення теоретичної міцності
за ізотропного (σ_{ht}), одновісного (σ_{un}) та зсувного (τ_s) навантажень
(E – емпіричні потенціали; S – оцінка тривкості)**

Кристал	σ_{ht} , GPa	σ_{un} , GPa		τ_s , GPa	
	теорія	теорія	експеримент	теорія	експеримент
C (dia)	88,5 [12]	95<111> [27] 130<100> [28]	20,7 (graph.) [29] 19,6 (graph.) [30]	96,6 <112> [31]	
W (ОЦК)	57,4 [32]	49,4 <110> [13] 37,5 <111> [13] 28,9 <100> [13]	28,3 <110> [33]	17,5 {110}[34] 17,4 {112}[34]	
Mo (ОЦК)	42,7 [1]	40,7 <110> [13] 28,4 <111> [13] 28,3 <100> [12]	19,8 <110> [33]	15,1 {110} [34] 14,8 {112} [34]	
Fe (ОЦК)	26,7 [35]	27,7 <111> [13] 33,0 <110> [13] 14,2 <001> [8]	13,1 <111> [30]	6,0 {112} [24]	3,56 <111> [30]
Cu (ГЦК)	20,2 [JAC]	5,2 <110> [13] 24,1 <100> [13] 9,3 <100> S [16] 20,3 <111> [13]	1,59 <110> McM] 1,74 <100> [29] 2,94 <111> [29]	5,90 <110>MSE08] 2,16 <112> [23]	0,61 <110> [30]
Si (dia)	15,5 [12]	26,3 <100> [12]	4,14 [29]	8,6 <112> [31]	
Ag (ГЦК)	11,4 [36]	12,3 <100> [37]	3,80<100> [30]	1,65 <112> [34]	0,71 <011> [30]
Al (ГЦК)	11,0 [37] 10,2 S [37]	4,5 <110>S [26] 9,0 <100>S [26] 8,8 <111> S [26]	2,27 (bend.) [29]	3,77 <110> [22] 3,07 <112> [26]	
Pb (ГЦК)	8,47 [38]			0,47 <112> E [21]	
Na (ОЦК)	2,2 [38]	0,9 <111> E [29] 0,04 <100> E [29] 0,2 <110> E [29]		0,20 <111> [39]	

Оскільки результати теоретичних обчислень одержали за нульової (абсолютної) температури, то доцільно охарактеризувати вплив температури на ТМ, зокрема, фононів у процесах деформації та руйнування. Хоч Френкель вважав [7], що зміни будуть такі самі, як і для модуля зсуву, все-таки історично для прогнозування впливу температури застосовували два важливі методи: модель Ейнштейна для гармонічних коливань, поєднану з критерієм втрати стабільності за

пружної деформації, та модель зародження дислокацій, що враховує температурну *флуктуацію фононів* [30]. За першим підходом прогнозують спад значень ТМ за одновісного навантаження у межах декількох процентів зі зміною температури від 0 до 1000 К. Такі зміни дуже подібні до тих, що впливають із змін модуля Юнга. Другий підхід розглядає максимальну енергію до 50 кТ, яку термічні флуктуації можуть викликати за будь-якої температури. Одержані за такого підходу результати демонструють 10%-не зменшення значень ТМ у цьому температурному інтервалі, що підтвердили також молекулярно-динамічні обчислення (MD) значень ТМ за зсуву монокристалів Cu та Al для температур 10 та 300 К [42]. Необхідно зауважити, що найбільш фізично обґрунтованим підходом до оцінки впливу температури буде т. зв. електронно-іонна динаміка на основі методу теоретичного (*ab initio*) обчислення, який зараз розвивається [43].

Теоретична міцність за багатовісного навантаження. Вплив одночасної дії різних компонентів тензора напружень на ТМ почали систематично вивчати після 2005 року. Група науковців – Поклуда та інші [12, 13, 17, 18] – моделювали дослідження на розтяг та стиск великої кількості кубічних кристалів у напрямках навантаження паралельно кристалографічним площинам $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$. Встановили, що максимальні напруження розтягу є функції орієнтації цих площин і майже лінійно збільшуються (зменшуються) залежно від характеру двовісних напружень (розтягу, стиску). Як правило, найбільша ТМ ідеальних кристалів відповідає ізотропному розтягувальному навантаженню. У цьому випадку до досягнення значення σ_{ht} нестабільність зсуву чи фононів відсутня. Кристали з ґраткою ГЦК мають найнижчі значення максимальних напружень розтягу (а також пов'язаних з ними деформацій) за навантаження вздовж напрямку $\langle 110 \rangle$. Однак ці значення дуже чутливі до прикладених поперечних двовісних напружень. Інша ситуація (найвищі значення напружень розтягу у напрямку $\langle 110 \rangle$ і дуже низька чутливість до поперечного напруженого стану) для кристалів із ґраткою ОЦК, що є найслабшими і найчутливішими до поперечного напруженого стану у напрямку розтягу $\langle 100 \rangle$. Однак виявили, що міцність кристалів С та Fe для цього напрямку дещо зменшувалася, а деяких кристалів, наприклад Cu, Ni, Ge, Si, суттєво знижувалася за двовісних напружень. Результати залежності граничної деформації від прикладеного одновісного напруженого стану виявили, що загалом гранична деформація металів із ґраткою ГЦК зменшувалася зі зростанням двовісного напруження, в той час як протилежна тенденція спостерігалася для металів із ОЦК структурою. Криві, побудовані для ромбовидних кристалів С, Ge та Si, мали максимум біля нульових двовісних напружень. Середнє значення в'язкості металів із ґраткою ГЦК було вищим, ніж з ОЦК структурою. На відміну від максимальних одновісних напружень розтягу, максимальні розтягальні були лінійно зростальними функціями стискувальних (розтягальних) двовісних напружень. Зауважимо, що оцінка характеру крихкості/в'язкості руйнування ідеальних кристалів на основі співвідношення σ_{ht}/τ_s якісно відповідає поведінці монокристалів та полікристалів з дефектами [1]. Отже, такий тип поведінки є, щонайменше частково, визначений попередньо заданими характерними особливостями кристалічної ґратки.

Ідеальну міцність на зсув (τ_s) обчислювали [22–25] як функцію значень нормальних напружень (σ_n), що діють на площинах зсуву. Встановили, що функція $\tau_s(\sigma_n)$ зростає (зменшується) із прикладенням стискувального (розтягувального) напруження практично для всіх металевих кристалів із ґратками ГЦК та ОЦК. Встановили одну просту фізичну причину такої особливості: стискувальні нормальні напруження забезпечують більше тертя в площинах зсуву, що зумовлює вищі напруження для подолання цього тертя, а за розтягу – навпаки. Однак керамічні кристали часто проявляють зворотну тенденцію порівняно з металами [31].

Це означає, що треба також враховувати міцність міжатомних зв'язків у площині зсуву.

Зародження дислокацій. Результати досліджень деформування кристалів за умов нановтискування дають корисну інформацію про дуже локальні характеристики матеріалів. Такі дослідження перспективні для визначення ідеальної міцності на зсув. Через невелику глибину проникнення індентора напружений об'єм під гострим наноіндентором може не мати попередньо існуючих дислокацій. Такий об'єм звичайно обмежується одним зерном (монокристалом) навіть для полікристалічних матеріалів. Таким чином, під час нановтискування зростає локальне напруження зсуву може досягати значення зсувної міцності і, як наслідок, дислокації можуть зароджуватися в ідеальній кристалічній ґратці. Таке зародження локальних пластичних деформацій ілюструє стрибок на кривій навантаження–зміщення, що виявили деякі автори (наприклад, [44]). За останні десять років побудовані наближені фізичні моделі досліджень з нановтискувань, які застосовано до кристалів Mo, W, Cu, та Ni [45–47]. Вони використовують складні *багатомасштабні* підходи. Для достатнього відтворення фізики процесу втискування за цими моделями слід дотримуватись таких основних вимог: початкові обчислення ідеальної міцності на зсув, включно з урахуванням дії нормальних напружень (σ_n); врахувати нелінійність взаємозв'язку напружень і деформацій у зоні дії індентора на виникнення акту зсуву; формулювати просторову модель для реалізації її методом кінцевих елементів під час нановтискувань. У межах таких моделей необхідно вимірювати значення сили втиснення та глибину проникнення індентора, які відповідають стрибку (зародження перших дислокацій). На такій основі в працях [42, 48] встановлено добре узгодження ($\pm 20\%$) експериментальних і розрахункових даних для деяких досліджуваних кристалів. Необхідно відзначити, що напруження зсуву для емісії дислокацій з меж зерен у полікристалах Al та Cu, передбачених методом MD [42, 48], тісно пов'язані з теоретичною міцністю зсуву.

РЕЗЮМЕ. Представлены результаты последних достижений атомистических вычислений теоретической (идеальной) прочности твердых тел (кристаллов) с акцентом на неэмпирические (ab initio) подходы и просинтезированы теоретические и экспериментальные данные. Показано, что характеристики вязкости/хрупкости поликристаллические материалы частично наследуют от матриц их идеальных кристаллов. Кроме того, реакция идеальных металлических кристаллов на трехосность (объемность) растяжений, выраженных через критическую деформацию, качественно отличается для инженерных материалов. Это объясняется ростом пластичности и объединением микропустот на частицах вторичных фаз при (трехосном) объемном растяжении. Рассчитанные значения теоретической прочности неэмпирическим (ab initio) и молекулярно-динамическим методами близки к значениям результатов реальных экспериментов.

SUMMARY. The article reports of recent achievements in atomistic calculations of theoretical (ideal) strength of solids with emphasize on ab initio approaches the synthesis of theoretical and experimental data (see Table) was done. It was shown that the characteristics of fracture toughness (brittleness) of polycrystals partially inherited from their (perfect) lattices. On the other hand, the response of perfect metallic crystals to the tensile triaxiality in terms of the ultimate strain is qualitatively different from that of engineering materials. This can be attributed to a plasticity driven growth and coalescence of microvoids at secondary phase particles under triaxial tension. The values of theoretical shear strength computed using ab initio and/or MD methods start to approach experimental data.

Подяка. Робота виконана за підтримки Міністерства освіти, молоді та спорту Чеської Республіки в рамках проекту MSM 0021630518. Автор також вдячний проф. д-ру М. Черни за плідні дискусії (факультет механічного машинознавства, Технологічний університет у м. Брно).

1. Pokluda J. and Šandera P. Micromechanisms of Fracture and Fatigue // In a Multiscale Context. Springer. – London, 2010. – 293 p.
2. Goldschmidt D. Single-Crystal Blades / Eds. D. Coutsouradis, et al. // Materials for Advanced Power Engineering. – Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 1994. – Part I. – P. 661.
3. Wallace D. C. (ed.) Thermodynamics of Crystals. – New York; London; Sydney; Toronto: John Wiley & Sons, 1972.
4. Mechanistic aspects and atomic-level consequences of elastic instabilities in homogeneous crystals / S. Yip, J. Li, M. Tang, J. Wang // Mater. Sci. Engng. – 2001. – **A317**. – P. 236.
5. Šob M., Wang L. G., and Vitek V. Local stability of higher-energy phases in metallic materials and its relation to the structure of extended defects. // Computational Mater. Sci. – 1997. – **8**. – P. 100.
6. Milstein F. and Farber B. Theoretical *fcc* → *bcc* Transition under [100] Tensile Loading // Physical Review Letters. – 1980. – **44**. – P. 277–280.
7. Calculations of Theoretical Strength: State of the Art and History / J. Pokluda, M. Černý, P. Šandera, M. Šob // J. of Computer-Aided Materials Design. – 2004. – **11**. – P. 1–28.
8. Phonon Instabilities and the Ideal Strength of Aluminum / D. M. Clatterbuck, C. R. Krenn, M. L. Cohen, J. W. Jr. Morris // Physical Review Letters. – 2003. – **91**. – 135501.
9. Kohn W. and Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Physical Review. – 1965. – **140**. – P. A1133–A1138.
10. First-principles calculations of the theoretical tensile strength of copper / E. Esposito, A. E. Carlson, B. D. Ling et al. // Philosophical Magazine. – 1980. – **A41**. – P. 251.
11. The role of ab initio electronic structure calculations in studies of the strength of materials / M. Šob, M. Friák, D. Legut et al. // Mater. Sci. and Engng. – 2004. – **A 387–389**. – P. 148–157.
12. Černý M. and Pokluda J. Influence of Superimposed Biaxial Stress on the Tensile Strength of Perfect Crystals from First Principles // Physical Review. – 2007. – **B76**. – 024115.
13. Černý M. and Pokluda J. Ideal Tensile Strength of Cubic Crystals under Superimposed Transverse Biaxial Stresses from First Principles // Ibid. – 2010. – **B82**. – 74106.
14. Li W. and Wang T. Ab initio investigation of the elasticity and stability of aluminium // J. of Physics: Condensed Matter. – 1998. – **10**. – 9889.
15. Ideal strength of bcc molybdenum and niobium / W. Luo, D. Roundy, M. L. Cohen, J. W. Jr. Morris // Physical Review. – 2002. – **B66**. – 094110.
16. Ab initio Calculations of Ideal Tensile Strength and Mechanical Stability in Copper / M. Černý, M. Šob, J. Pokluda, P. Šandera // J. of Physics: Condensed Matter. – 2004. – **16**. – P. 1045.
17. Černý M. and Pokluda J. The theoretical strength of fcc crystals under multiaxial loading // Computational Mater. Sci. – 2011. – **50**. – P. 2257–2261.
18. Řehák P., Černý M., and Pokluda J. The [100] Compressive Strength of Perfect Cubic Crystals under Superimposed Biaxial Stresses // Key Engng Mater. – 2011. – **465**. – P. 183–186.
19. Kamran S., Chen K., and Chen L. Ab initio examination of ductility features of fcc metals // Physical Review. – 2009. – **B79**. – 024106.
20. Paxton A. T., Gumbsch P., and Methfessel M. A quantum-mechanical calculation of the theoretical strength of metals // Philosophical Magazine Letters. – 1991. – **63**. – P. 267.
21. Šandera P. and Pokluda J. Improvement of the Mackenzie Theory on Ideal Shear Strength // Scripta Metallurgica and Materialia. – 1993. – **29**. – P. 1445.
22. Černý M. and Pokluda J. Influence of Normal Stress on Theoretical Shear Strength of *fcc* Metals // Mater. Sci. and Engng. – 2008. – **A 483–484**. – P. 692–694.
23. Černý M. and Pokluda J. Influence of Superimposed Normal Stress on the <112>{111} Shear Strength in Perfect fcc Metals // Computational Mater. Sci. – 2008. – **44**. – P. 127–130.
24. Černý M., Šesták P., and Pokluda J. Influence of Superimposed Normal Stress on Shear Strength of Perfect bcc Crystals // Ibid. – 2010. – **47**. – P. 907–910.
25. Černý M. and Pokluda J. The Theoretical Shear Strength of fcc Crystals under Superimposed Triaxial Stress // Acta Materialia. – 2010. – **58**. – P. 3117–3123.
26. Černý M. and Pokluda J. The Theoretical Tensile Strength of fcc Crystals Predicted from Shear Strength Calculations // J. of Physics: Condensed Matter. – 2009. – **21**. – 145406.

27. Roundy D. and Cohen M. L. Ideal strength of diamond, Si, and Ge // Physical Review. – 2001. – **B64**. – 212103.
28. Theoretical Strength and Cleavage of Diamond / R. H. Telling, C. J. Pickard, M. C. Payne, J. E. Field // Physical Review Letters. – 2000. – **84**. – P. 5160–5163.
29. Macmillan N. H. Atomistics of Fracture / Eds. R. M. Latanision, J. R. Pickens. – New York: Plenum Press, 1983. – P. 95.
30. Kelly A. and Macmillan N. H. Strong Solids. – Oxford: Clarendon Press, 1986.
31. Umeno Y. and Černý M. Effect of Normal Stress on the Ideal Shear Strength in Covalent Crystals // Physical Review. – 2008. – **B77**. – 100101.
32. Calculation of Theoretical Strength of Solids by Linear Muffin-Tin Orbitals (LMTO) Method / P. Šandera, J. Pokluda, L. G. Wang, M. Šob // Mater. Sci. and Engng. – 1997. – **A234**. – P. 370–372.
33. Inherent tensile strength of molybdenum nanocrystals / A. P. Shpak, S. O. Kotrechko, T. I. Mazilova, I. M. Mikhailovskij // Sci. and Technology of Advanced Materials. – 2009. – **10**. – 045004.
34. Ideal shear strain of metals and ceramics / S. Ogata, J. Li, N. Hirotsuki, et al. // Physical Review. – 2004. – **B70**. – 104104.
35. Ab initio Calculations of Elastic and Magnetic Properties of Fe, Co, Ni, and Cr Crystals under Isotropic Deformation / M. Černý, J. Pokluda, P. Šandera, M. Šob // Physical Review. – 2003. – **B67**. – 035116.
36. Černý M. and Pokluda J. Stability of fcc Crystals under Hydrostatic Loading // J. of Alloys and Compounds. – 2004. – **378**. – P. 159–162.
37. Černý M., Pokluda J., and Šandera P. Ab initio analysis of theoretical isotropic strength and elasticity of nickel aluminide compounds // Mater. Sci. and Engng. – 2004. – **A 387–389**. – P. 923–925.
38. Černý M., Šandera P., and Pokluda J. Ab initio Calculation of Ideal Strength for Cubic Crystals under Three-axial Tension // Czechoslovak Journal of Physics. – 1999. – **49**. – P. 1495–1501.
39. Morris J. W. and Krenn C. R. The internal stability of an elastic solid // Philosophical Magazine. – 2000. – **A80**. – P. 2827–2840.
40. Calculation of theoretical strengths and bulk moduli of bcc metals / Y. Song, R. Yang et al. // Physical Review. – 1999. – **B59**. – 14220.
41. Černý M. Elastic Stability of Magnetic Crystals under Isotropic Compression and Tension // Mater. Sci. and Engng. – 2007. – **A462**. – P. 432–435.
42. Tschopp M. A. and McDowell D. L. Dislocation nucleation in $\Sigma 3$ asymmetric tilt grain boundaries // Int. J. of Plasticity. – 2008. – **24**. – P. 191–217.
43. Correlated electron-ion dynamics in metallic systems / Horsfield, et al. // Computational Mater. Sci. – 2008. – **44**. – P. 16–20.
44. Göken M., Kempf M., and Nix W. D. Hardness and modulus of the lamellar microstructure in PST-TiAl studied by nanoindentations and AFM // Acta Materialia. – 2001. – **49**. – P. 903–911.
45. Connecting atomistic and experimental estimates of ideal strength / C. R. Krenn, D. Roundy, M. L. Cohen et al. // Physical Review. – 2002. – **B65**. – 134111.
46. Onset of Microplasticity in Copper Crystal during Nanoindentation / J. Horníková, M. Černý, P. Šandera, J. Pokluda // Key Engng Mater. – 2007. – **348–349**. – P. 801–804.
47. Multiscale Modelling of Nanoindentation Test in Copper Crystal / J. Horníková, P. Šandera, M. Černý, J. Pokluda // Engng Fract. Mech. – 2008. – **75**. – P. 3755–3762.
48. Tschopp M. A., Spearot D. E., and McDowell D. L. Atomistic simulations of homogeneous dislocation nucleation in single crystal copper // Modelling and Simulation in Mater. Sci. and Engng. – 2007. – **15**. – P. 693–709.

Одержано 25.05.2011