

В работе [31] расчет был сделан для пяти групп кластеров.

Основные результаты расчетов следующие. Когда атом примеси попадает в кластер из атомов основного металла, возникают связи разного типа: для сильно охрупчивающего элемента (серы в никеле или железе) заряд концентрируется главным образом на атомах примеси и образующаяся гетерополярная связь может быть описана как ионная. В этом случае обеднение атомов основного металла зарядом означает уменьшение числа связей металл—металл, что приводит к понижению когезивной прочности и зернограничному охрупчиванию.

В отличие от этого для примесей, повышающих когезивную прочность (бор на границах зерен никеля), заряд более равномерно распределяется между основным металлом и примесью — возникает гомеополярная или ковалентная связь, что дополнительно увеличивает когезивную прочность на границе.

Фосфор в железе представляют собой промежуточный случай между этими крайними. Проведенный теоретический анализ находится в согласии с экспериментом: наличие серы в железе вызывает сильное охрупчивание, фосфора — небольшое охрупчивание, углерод повышает когезивную прочность границ; никель сильно охрупчивает сера, а бор повышает когезивную прочность границ. Поскольку атомы некоторых из сильно охрупчивающих примесей значительно крупнее металлических, то возможно, кроме обеднения металлической связи зарядами, охрупчивающие элементы удлиняют связи металл—металл.

В работе [33] исследовали среднеуглеродистую сталь, содержащую сурьму. Механические испытания проводили на образцах гладких и надрезанных с предварительно нанесенной трещиной. Методом статистического анализа данных Оже-спектроскопии по распределению сурьмы определяли критическую локальную концентрацию напряжений разрушения в зависимости от содержания сурьмы на границе зерен.

Авторы пришли к выводу, что фундаментальным параметром, контролирующим сопротивление хрупкому разрушению, является энергия пластической деформации (энергия, затрачиваемая на движение дислокации вблизи вершины микротрещины) γ_d , которая сильно меняется при изменении поверхностной энергии. Поэтому сегрегирующая примесь может существенно уменьшить общую энер-