

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-05-16U

Т.М.Верхоляк, В.В.Ігнатюк

АНАЛІЗ НАЙПРОСТІШИХ МОДЕЛЕЙ ФОРМУВАННЯ
МІКРОТРИЩИН

ЛЬВІВ

УДК: 539.3

PACS: 62.20.Mk, 64.60.Qb

Аналіз найпростіших моделей формування мікротріщин

Т.М.Верхоляк, В.В.Ігнатюк

Анотація. Беручи за основу деякі феноменологічні моделі дефектоутворення в твердих тілах, проведено аналіз формування мікротріщин (МТ) всередині фрагментів лавоподібних паливовмісних матеріалів. Розглянута модель Гріффітса для двовимірної МТ модифікується з врахуванням дифузії частинок на поверхні мікротріщини. Для цієї моделі розраховані енергії активації, що визначають часи нуклеації та росту МТ. Цей формалізм застосовується також для моделі Френкеля, яка передбачає взаємодію між краями МТ в ділянці вершинної зони. Приводяться також результати для профілів МТ, які формуються в пластичних матеріалах за дислокаційним механізмом, та аналізується ефективність та вірогідність застосування згаданих моделей.

An analysis of some simple models of the microcracks formation

T.M.Verkholyak, V.V.Ignatyuk

Abstract. Basing on some phenomenological theories of the crack formation in solids, an analysis of the creation of microcracks (MC) inside lava-like fuel-containing materials has been performed. The considered Griffith model for the two-dimensional MC is modified taking into account the diffusion of particles on the crack surface. For this model the activation energies, that define the times of the MC nucleation and growth, is calculated. This formalism is applied to the Frenkel model which assumes the interaction between the MC edges in the tip zone. The results for the MC profiles in plastic materials are also presented and the efficiency of the mentioned models are analyzed.

Подається в Condensed Matter Physics
Submitted to Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2005
Institute for Condensed Matter Physics 2005

1. Вступ

Дослідження радіаційного дефектоутворення в лавоподібних паливовмісних матеріалах (ЛПВМ) є надзвичайно актуальними з точки зору заходів, що мають передувати роботам по перетворенню об'єкту “Укриття” в екологічно безпечний об'єкт [1], оскільки допомагають вирішити питання про міцнісні характеристики конструкційних матеріалів об'єкту “Укриття”. В даній роботі ми торкнемося деяких аспектів опису радіаційного дефектоутворення, зокрема – феноменологічних моделей розвитку мікротріщин всередині аморфних (або частково закристиалізованих) областей ЛПВМ, оскільки динаміка інших макродефектів (порожнин, кластерів вакансій) є дуже подібною до еволюції мікротріщин (МТ).

З експериментальних спостережень відомо [2], що формування тріщин як в пластичних, так і в крихких матеріалах відбувається за подібним сценарієм: зародження, росту та коалесценції пустот субмікронного розміру. Відмінність полягає лише в різній довжині новоутворених зародків тріщин: в тілах типу кераміки вони становлять ~ 10 нм, що на три порядки менше, ніж в металах і сплавах. Можна з впевненістю стверджувати, що зародження таких нанопустот відбувається в областях пониженої концентрації, прикладом яких можуть бути розвпорядковані області всередині латентних треків [3]. В процесі опромінення в розвпорядкованих областях будуть виникати локальні зміни об'єму, причому оточуючий матеріал буде перешкоджати таким об'ємним змінам, що спричинятиме виникнення помітних механічних напружень в матрицях ЛПВМ. Таким чином, радіаційно пошкоджені області всередині ЛПВМ стають акумуляторами внутрішніх напружень, що поширюються попереду вже сформованої МТ певної початкової довжини l_{min} , і ведуть до швидкого збільшення розмірів останньої при наближенні l до критичної межі. І хоча негайного руйнування ЛПВМ не відбудеться внаслідок малого розміру розвпорядкованих областей і подальшої релаксації напружень внаслідок послаблення внутріатомних зв'язків, можливий механізм “сповільненої” деградації матеріалу, який пов'язаний з термоактивацією внутрішніх напружень [4–6] та гетерогенною структурою ЛПВМ.

Експериментальні вимірювання [2] швидкості поширення МТ дають значення від $v = 10^{-11} \div 10^{-9}$ м/с (при напруженнях, які значно менші, ніж межа міцності керамік) до $v = 10^{-6}$ м/с (для підкритичних значень напружень), причому в частково закристиалізованих матеріалах спостерігається стрибкоподібне поширення МТ, а флуктуації швидкості при малих напруженнях порівняльні з v та можуть

досягати величини 10^{-10} м/с. При досягненні МТ певного критичного розміру l_c подальше поширення дефекту відбуватиметься з швидкістю звуку, що приведе до майже миттєвого руйнування твердого тіла, коли магістральна тріщина стає співмірною з лінійними розмірами системи.

Стрімке зростання потужностей та швидкодії сучасних комп'ютерів дало змогу моделювати процеси поширення МТ. В цьому контексті варто виділити оглядову роботу [7], в якій детально описано методологію комп'ютерного моделювання при дослідженні поширення МТ як в пружних тілах (типу силікатів), так і в пластичних (металах). Комп'ютерний експеримент показав, що у випадку напружень розтягу при швидкостях менших від $1/3 v_R$ (v_R – швидкість звуку на поверхні твердого тіла, яку також називають швидкістю Релея) МТ поширюється вздовж прямої лінії, при $v = v_R/3$ кінчик МТ (її вершинна зона) починає огрублюватись, а при $v = 2v_R/3$ – відхиляється від початкової лінії поширення та починає осцилювати в перпендикулярному напрямі. Остання обставина пов'язана з динамічними нестійкостями в системі, а зигзагоподібне поширення МТ відбувається завдяки включенню дислокаційного механізму. Таким чином, відбувається перехід від пружної динаміки до пластичної, при якій збільшення напружень в околі МТ веде не до її росту, а до округлення та уширення її країв. В будь-якому випадку, оцінкою зверху для максимальної швидкості поширення МТ може служити v_R .

У випадку зсувних напружень спостережувана картина стає значно цікавішою: при збільшенні навантаження відбувається різкий стрибок швидкості поширення МТ до величини, яка перевищує поперечну швидкість звуку в твердому тілі v_T . Далі попереду материнської мікротріщини формуються дочірні МТ, які ростуть в поперечному напрямі. Відтак, поширення фронту мікротріщин досягає величини поздовжньої швидкості звуку в твердому тілі v_L . Більше того, якщо потенціал міжатомної взаємодії має ангармонічну складову, а модуль Юнга збільшується з ростом напружень (hyperelastic materials – надпружні матеріали), то можливе поширення МТ з надзвуковою швидкістю $v > v_L$. Особливо цікавою динаміка поширення МТ стає у випадку, якщо зразок, що моделюється в комп'ютерному експерименті, складається з пружної та надпружної компонент, розділених межею поділу. Послідовність подій в такій системі є наступною:

1. при швидкості МТ порядку v_R в лінійній (відношення “модуль Юнга/напруження” є константою) частині зразка починають

формуватись дочірні мікротріщини.

2. Швидкість дочірніх МТ стрибкоподібно зростає до $v_T < v < v_L$.
3. При досягненні МТ швидкості порядку v_L дочірні МТ дають життя наступній генерації мікротріщин.
4. Останні МТ досягають швидкості $v = 1.6$ Маха. При цьому швидкість їх поширення співпадає з швидкістю МТ в нелінійній частині зразка.

Таким чином, ріст напружень в вершинній зоні МТ приводить до зміни матеріальних констант, що, в свою чергу, збільшує швидкість поширення МТ аж до критичних величин.

До інших плюсів комп'ютерного експерименту можна віднести те, що останній допускає першопочаткове розділення просторових масштабів в системі: на відстанях $l < 1$ нм явним чином проводиться моделювання кластерів електронних збуджень; на субмікронних відстанях стають застосовними методи молекулярної динаміки, а на мікронних масштабах можна використовувати модель суцільного середовища. Подібне просторове розбиття системи дозволяє об'єднати різні методи комп'ютерного експерименту, що описують фізичні процеси різної природи, в єдиний потужний засіб моделювання динаміки поширення МТ.

Однак зрозуміло, що комп'ютерний експеримент при всій візуалізації процесів, може слугувати для опису динаміки МТ в певних структурованих твердих тілах, коли досліднику відомі характерні потенціали міжатомної взаємодії, просторово-часові масштаби чи відповідні матеріальні константи. В іншому випадку більш ефективним може бути опис динаміки МТ на мові кінетичних рівнянь [8]. Функція розподілу мікротріщин від координат i /або швидкостей знаходиться аналітично або чисельно для певної конфігурації зовнішніх полів напружень. Однак в цьому методі необхідно мати інформацію і про рівноважні характеристики системи. Зокрема, для обчислення швидкості поширення МТ необхідно знати вільну енергію мікротріщини $F(\sigma, l)$. Диференціюючи останню за довжиною МТ l , можна отримати вираз для швидкості $v = -K\partial F(\sigma, l)/\partial l$, де K – певний додатний кінетичний коефіцієнт. З іншого боку, беручи похідну від вільної енергії за напруженням σ , можна обчислити деформацію матеріалу ε в околі МТ. У випадку, якщо ε є малим, можна побудувати рівноважну теорію збурень за деформацією. Іншими складовими кінетичної теорії є часи нуклеації та росту МТ. Для розрахунку остан-

ніх потрібно мати інформацію про відповідні енергії активації, які, в свою чергу, можна обчислити на основі вільної енергії мікротріщини.

В даній роботі ми проведемо аналіз формування МТ всередині фрагментів ЛПВМ, беручи за основу деякі феноменологічні моделі дефектоутворення в твердих тілах. Спочатку ми розглянемо модель Гріффітса [9] для двомірної МТ, що виникає в напрямку, перпендикулярному до прикладеного розтягуючого зусилля. Далі ця модель буде модифікованою з врахуванням дифузії частинок на поверхні мікротріщини. Для цієї моделі будуть розраховані енергії активації, що визначають часи нуклеації та росту МТ. В третьому розділі даний формалізм буде застосований для моделі Френкеля [10], для якої в ділянці вершинної зони існує взаємодія між краями МТ. Також буде приведено результати для профілів МТ, які формуються в пластичних матеріалах за дислокаційним механізмом. Наприкінці будуть зроблені висновки щодо ефективності та вірогідності застосування тих чи інших моделей.

2. Модель Гріффітса

В рамках мезоскопічного підходу до опису дефектів основним механізмом формування МТ вважається термоактивація флуктуацій внутрішніх напружень. Згідно гіпотези Гріффітса [9], для моделі двомірної МТ, що виникає в напрямку, перпендикулярному до прикладеного розтягуючого зусилля, можна записати наступний вираз для вільної енергії на одиницю довжини тріщини:

$$F(\sigma, l) = \gamma l - \frac{l^2 \sigma^2}{2E}, \quad (2.1)$$

де перший член відповідає енергії, яку потрібно затратити для створення МТ довжини l , а другий описує зміни енергії в пружному середовищі при виникненні МТ. Решта величин в рівнянні (2.1) мають наступний зміст: E – модуль Юнга, σ – внутрішнє напруження в околі МТ, γ – енергія, яку необхідно затратити для збільшення площі поверхні МТ на одиницю; з достатньою точністю її можна апроксимувати виразом $\gamma = Ea$, де a означає міжатомну відстань. Якщо говорити про форму профілю МТ $y(x)$ (вісь $0x$ спрямована вздовж МТ, а $0y$ – в перпендикулярному напрямі), то вона апроксимується еліпсом

$$y(x) = d\sqrt{1 - (x/l)^2}, \quad (2.2)$$

велика піввісь якого має довжину мікротріщини l , а мала дорівнює

$$d = l\sigma/E. \quad (2.3)$$

Тут і далі ми вважатимемо деформацію малою, $\varepsilon = \sigma/E \ll 1$; відповідно, максимальне розкриття МТ d значно менше l .

Максимум енергії (2.1) визначає критичний розмір МТ

$$l_c = \frac{\gamma E}{\sigma^2} = a \frac{E^2}{\sigma^2}, \quad (2.4)$$

при досягненні якого починається швидке руйнування матеріалу (тріщина досягає макроскопічних масштабів). З іншого боку, зменшення початкових розмірів веде до зменшення $F(\sigma, l)$, тому зникнення початкових дефектів також є енергетично вигідним. Під терміном “початкові дефекти” будемо вважати наявність в матриці ЛПВМ певної кількості МТ з характерними розмірами $l_{min} \ll l_c$. У випадку однорідної системи масштаб l_{min} в основному визначатиметься кінетичними процесами (в першу чергу – дифузією вакансій) за механізмом, подібним до описаного в роботі [11]. При такому підході l_{min} можна ототожнити зі стаціонарним розв’язком кінетичного рівняння, що описує динаміку дефектоутворення. В загальному випадку таке кінетичне рівняння матиме достатньо складну структуру і його розв’язок залежатиме від потужності випромінювання, концентрації вакансій та коефіцієнта дифузії точкових дефектів. Другим суттєвим фактором, який впливає на розміри l_{min} зародкових МТ, є наявність внутрішніх напружень як результату локальних деформацій матеріалу ЛПВМ, що виникають при формуванні розупорядкованих областей [3], а також в області латентних треків [12]. При цьому, з одного боку, міняється концентрація та геометрія МТ (що, в свою чергу, може вести до зміни l_{min} , з іншого – ефективні пружні характеристики матеріалу [13]. Можна стверджувати, що дифузійні процеси при умові постійної генерації вакансій майже не впливають на зміну l_{min} , якщо взаємодією МТ можна знехтувати, а їх концентрація незначна. Другий фактор впливає на еволюцію МТ двоюким чином: і) збільшуючи концентрацію МТ; ii) змінюючи матеріальні константи ЛПВМ.

Для подальших розрахунків необхідно дати більш формальне визначення l_{min} на основі рівн. (2.3): ми вважатимемо, що розкриття МТ d не може бути меншим за міжатомну відстань a . Таке означення мінімальної довжини МТ є досить логічним, адже, як буде показано

в наступному розділі, можна константувати відсутність в кристалічних твердих тілах МТ, максимальне розкриття яких менше, ніж відстань між сусідніми атомними площинами. Відповідно, довжина такої МТ l_{min} становитиме

$$l_{min} = aE/\sigma \equiv a/\varepsilon \gg a. \quad (2.5)$$

Швидкість розвинення МТ, вільна енергія якої описується виразом (2.1), визначається законом Арреніуса

$$\tau^{-1} \sim \exp[-E_c/(k_B T)]. \quad (2.6)$$

Енергія активації E_c визначається величиною вільної енергії при досягненні МТ критичної довжини l_c і дорівнює

$$E_c \equiv aF(\sigma, l_c) = a\gamma^2 E/(2\sigma^2) = a^3 E/2(1/\varepsilon)^2. \quad (2.7)$$

В наступному розділі ми покажемо, що врахування термоактивованих флуктуаційних процесів веде до зменшення часу формування МТ (збільшення швидкості τ^{-1}).

3. Модифікована теорія Гріффітса

Результати теорії Гріффітса можна модифікувати [4] шляхом врахування поверхневих дифузійних процесів і реконструкції поверхні МТ. На відміну від теорії Гріффітса, в якій допускається самовільне заліковування МТ на малих часах внаслідок термоактивованих флуктуаційних процесів (при загальному направленому рості МТ), врахування реконструкції поверхні приводить до заліковування МТ, і, як наслідок, зменшення часу її існування. Вважається, що розмір МТ l зростає внаслідок термоактиваційних процесів та направленої дифузії і знаходиться в діапазоні $l_{min} = aE/\sigma < l < l_c = aE^2/\sigma^2$. МТ довжини $l < l_{min}$ подібні до відпалених дефектів в твердому тілі і будуть заліковуватись внаслідок поверхневої дифузії. При $l > l_{min}$ МТ будуть направлено рости, поки не досягнуть критичного розміру (2.4), після чого відбудеться майже миттєве руйнування матеріалу.

Відповідно, швидкість зародження МТ мінімальної довжини визначається формулою однотипною з (2.6), однак тепер енергія активації

$$E_{nucl} \equiv aF(\sigma, l_{\min}) \cong a\gamma l_{\min} = a^3 E/\varepsilon \quad (3.1)$$

буде значно меншою, ніж (2.7).

Для розрахунку часу росту МТ слід прийняти наступну робочу гіпотезу: процес розвитку МТ являє собою направлену дифузію частинок вздовж поверхні тріщини на відстанях порядку протяжності вершинної зони $s(l)$ (tip zone, [4,5]). Остання визначається як координата $x = l - s(l)$, при якій розкриття МТ $y(x)$ стає рівним міжатомній відстані a . Зрозуміло, що поверхнева дифузія частинок всередину вершинної зони є неможливою, а сама величина $s(l)$ визначається з рівняння (2.2) наступним чином:

$$s(l) = a^2 E^2 / (l\sigma^2). \quad (3.2)$$

З рівн. (3.2) безпосередньо впливає, що протяжність вершинної зони $s(l)$ зменшується з l_{\min} до a при рості МТ від l_{\min} до l_c . Ріст МТ набуває направленою характеру лише при збільшенні l на величину $s(l)$. В протилежному випадку, коли $l(t + \Delta t) - l(t) < s(l)$, процеси поверхневої дифузії, які приводять до реконструкції форми країв МТ (і, відтак, сповільнюють заживляння МТ) стають неможливими, а отже термоіндуковані флуктуації можуть приводити до спонтанного закриття тріщини. Час Δt , необхідний для росту МТ на величину $s(l)$, у вищому наближенні за деформацією можна оцінити як $\Delta t(l) \sim \exp[a\gamma s(l)/(k_B T)]$. Відповідно, швидкість направленого росту МТ при збільшенні її довжини з l до $l + s(l)$ визначається формулою

$$v(l) = s(l)/\Delta t(l) \sim s(l) \exp[-a\gamma s(l)/(k_B T)]. \quad (3.3)$$

Звідси для температур, значно менших від температури плавлення матеріалу, легко отримати оцінки для часу росту МТ τ_{growth} :

$$\tau_{growth} = \int_{l_{\min}}^{l_c} \frac{dl}{v(l)} \cong \tau_{01} \exp\left[\frac{a^3 E}{k_B T}\right] + \tau_{02} \exp\left[\frac{a^3 E}{k_B T \varepsilon}\right]. \quad (3.4)$$

Як видно з (3.4), вклад в τ_{growth} дають дві енергії активації. Перша з них виникає від верхньої межі інтегралу, по порядку величини вона дорівнює поверхневій енергії вершинної зони завдовжки

$s(l_c) = a$ і в $1/\varepsilon$ разів менша за другу енергію активації. Відтак, першим складовим в рівнянні (3.4) можна знехтувати, а друга активаційна енергія має той же порядок, що і енергія нуклеації МТ (див. рівн. (3.1)).

Звідси напрашується висновок, що при врахуванні направленої термоактивованої дифузії швидкості зародження τ_{nucl}^{-1} та росту τ_{growth}^{-1} , по-перше, *мають однаковий порядок*, по-друге – *вони значно більші від швидкості (2.6)*, яку передбачає теорія Гріффітса. Вирази (3.4), як було показано в роботі [5], добре надаються і для опису еволюції мікропорожнин (кластерів вакансій). Саме за таким механізмом (зародження, розвитку та коалесценції мікропор), як показують експериментальні дослідження [2], відбувається розповсюдження МТ.

Передекспоненційні множники в (3.4) можна оцінити, з виразу, отриманого в рамках цього ж термоактиваційного формалізму [6]:

$$\tau_0 = \frac{4}{L_{eff}} \sqrt{\frac{k_B T}{aE}} \frac{l_c}{l_{\min}} \frac{l_{\min}}{v_0}, \quad (3.5)$$

де v_0 означає початкову швидкість поширення МТ, L_{eff} – середню відстань, на якій релаксують термоактивовані внутрішні напруження. Зауважимо, що внаслідок наближень, які робили при отриманні (3.5), величина передекспоненційного множника τ_0 завищена. Крім того, при отриманні рівнянь (3.4)-(3.5) ми не брали до уваги неоднорідність матеріалу ЛПВМ. В роботі [14] було показано, що врахування випадкових сил та напружень через усереднення за функцією розподілу “замороженого” безладу веде до значного підвищення (в кілька разів) ефективної температури середовища T_{eff} (або, що є тожним, до зниження енергії активації $E = a\gamma l_{\min}^2$) і зменшення тривалості існування МТ. Не приймалась також до уваги взаємодія між краями МТ у її вершинній зоні [7], яка може певним чином модифікувати профіль мікротріщини, і, як наслідок – її вільну енергію [10]. Подібні розрахунки будуть проведені в наступному підрозділі.

4. Модифікація теорії Френкеля на випадок термоактивованої направленої дифузії

Як експериментальні дослідження [2], так і теоретичні розрахунки на основі реалістичних моделей [10] показують: тріщини, які виникають в твердому тілі, повинні мати не заокруглені краї, як це неясним чином постулюється в теорії Гріффітса, а гострі, що відповідає

постійному зближенню поверхонь розділу при $x \rightarrow l$. В теорії Гріффітса похідна від $y(x)$ (див. рівн. (2.2)) в точці, де закінчується МТ, прямує до безмежності, що позбавлено фізичного сенсу. Сам радіус кривизни МТ в її вершинній зоні при наближенні l до свого критичного значення (2.4) дорівнює міжатомній відстані a , що також не узгоджується з даними як експерименту, так і комп'ютерних симуляцій [7].

Існують різні підходи для розрахунку профілю МТ в її вершинній зоні. Зокрема в [15], де в основу формування МТ був покладений дислокаційний механізм, отримані наступні значення для профілів МТ: $y(x) \sim \sqrt{l-x}$ при $s(l) \ll l-x \ll l$, та $y(x) \sim (l-x)^{3/2}$ при $s(l) \sim l-x \ll l$. Хоча в цьому підході для оцінки протяжності вершинної зони береться інший вираз $s \sim (ar_0^2)^{1/3}$ ($r_0 \gg a$ визначає радіус дії міжатомних сил між краями МТ), ми бачимо, що похідна від $y(x)$ зануляється при $x = l$, а сама МТ має безмежно гострий край. Крім того, в даному підході кінчик МТ стає незалежним від прикладених напружень, хоча в основній частині МТ залежність $y(x)$ від навантаження зберігається.

Замість дислокаційного механізму формування МТ ми будемо розглядати все той же пружний режим. Однак тепер будемо вважати, що між краями тріщини існує взаємне притягання, яке задається наступним виразом:

$$f(x) = \frac{E}{a} y(x) \exp\left[-\frac{y(x)}{a}\right], \quad (4.1)$$

де $f(x)$ – сила притягання на одиницю площі. Сила $f(x)$ є відмінною від нуля в досить вузькій області порядку протяжності вершинної зони, при чому її максимум досягається при $x = l - s(l)$. Вибір цієї сили в формі (4.1) є достатньо вмотивованим: інтегруючи (4.1) по y ми отримуємо поверхневу енергію неповністю розкритої тріщини

$$\gamma(y) = \int_0^y f(y') dy' = Ea [1 - (y/a + 1) \exp[-y/a]], \quad (4.2)$$

яка в границі $y \rightarrow \infty$ дає оцінку для поверхневої енергії $\gamma = Ea$, що повністю співпадає з даними інших феноменологічних підходів.

Для того, щоб отримати певні аналітичні оцінки, задамо геометрію нашої квазітримірної тріщини: будемо вважати, що МТ виникає під дією лінійної сили F , яка діє на край досліджуваної області, що

має форму бруска перерізу $b \times c$ та довжини l . Дана сила розщеплює пластинку і приводить до утворення МТ. Зауважимо, що така модель виглядає досить достовірною для опису тріщиноутворення в приповерхневій області ЛПВМ і може використовуватись для моделювання одного з можливих механізмів поверхневого руйнування опроміненого ядерного палива.

При даних умовах форма верхньої половини пластинки задається диференціальним рівнянням [10]:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{M}{EI}, \quad (4.3)$$

де $I = 1/(4b^3c)$ означає момент інерції плоского перерізу, а момент сил M , прикладених до напівпластинки відносно точки $x = 0$ задається наступною формулою:

$$M(x) = Fx - c \int_0^x x' f(x') dx'.$$

Таким чином, рівняння (4.3) виявляється еквівалентним наступному диференціальному рівнянню третього порядку:

$$\frac{d^3 y}{dx^3} = \frac{1}{EI} [F - xc f(x)], \quad (4.4)$$

яке слід розв'язувати з граничними умовами $y(l) = 0$, $y'(l) = 0$, $y''(0) = 0$. Очевидно, що нелінійне диф. рівняння (4.4) допускає лише чисельний розв'язок. Однак в основній частині МТ, коли дією сили міжчастинкового притягання можна знехтувати, ми можемо отримати нульове наближення для форми профілю МТ в наступній формі:

$$\bar{y}_0(\bar{x}) = \frac{\alpha}{6} [\bar{x}(\bar{x}^2 - 3\bar{l}^2 + 2\bar{l}^3)], \quad \alpha = \frac{4F}{Ea^2 b^3 c}, \quad (4.5)$$

де всі просторові величини безрозмірені згідно $\bar{x} = x/a$. Надалі ми будемо опускати знак “–” і виражати всі змінні в сталих ґратки a .

Для отримання потенціальної енергії нашої системи $U(F, l)$ зауважимо, що вона складається з трьох доданків. По-перше, це пружна енергія деформованої пластинки, яку можна оцінити як $U_1 = -\frac{1}{2} F y_0(x = 0)$; по-друге, це поверхнева енергія повністю розділеної основної частини МТ $U_2 = \gamma l$, по-третє, це енергія вершинної

зони МТ $U_3 = \int_{l-s(l)}^l dx \gamma(y_0(x))$. Протяжність вершинної зони $s(l)$

може бути отримана аналітично з рівняння (4.5) шляхом прирівнювання його правої частини до одиниці і при великих l веде себе як $s(l) = \sqrt{2/(\alpha l)}$. Аналогічним чином можна отримати рівняння для мінімальної довжини МТ (довжини, при якій розкриття тріщини в точці $x = 0$ стає рівним одній міжатомній відстані). Як і в модифікованій теорії Гріффітса-Голубовича $s(l_{\min}) = l_{\min}$, але тепер вона веде себе як

$$l_{\min} = \sqrt[3]{3/\alpha}. \quad (4.6)$$

Однак, навіть беручи в якості профілю МТ його нульове наближення (4.5), неможливо отримати аналітичний вираз для складової потенціальної енергії U_3 . Натомість, можна отримати явний вираз для похідної потенціальної енергії $U(F, l) = U_1(F, l) + U_2(l) + U_3(F, l)$, беручи до уваги вирази (4.2), (4.5). Нулі $\partial U(F, l)/\partial l$ визначатимуть положення стійкої рівноваги МТ а також максимальне значення l , після досягнення якого відбуватиметься миттєве руйнування тріщини. Подібний підхід був застосований в роботі [10] з тою відмінністю, що замість умови $\partial U_3(F, l)/\partial l = \gamma(y_0(l))$ бралась асимптотика профілю МТ в її вершинній зоні у вигляді

$$U_3(F, l) = \frac{F^2}{Ea^2c^2} \frac{1}{l}, \quad (4.7)$$

яка отримується в лінійному наближенні за y після прирівнювання правої частини (4.4) до нуля. Хоча остання процедура буде справедливою не у всій вершинній зоні, а в тій її частині, коли сили міжчастинкового притягання врівноважують зовнішню силу, причому $y(x) \ll a$, наші оцінки показали, що вираз (4.7) може бути хорошою апроксимацією для потенціальної енергії вершинної зони МТ. В цьому нас переконують дані Рис. 1, де зображено залежність похідної потенціальної енергії МТ $\partial U(F, L)/\partial L$ від довжини МТ. Крива 1 відповідає U' при врахуванні скінченної довжини МТ та явного вигляду функції $s(l)$, крива 2 описує похідну потенціальної енергії, коли для довжини вершинної зони МТ береться її асимптотичне значення $s(l) = \sqrt{2/(\alpha l)}$, а крива 3 відповідає модельному потенціалу теорії Френкеля з U_3 в формі (4.7). Слід зауважити, що випадки 2 і 3 допускають формальне існування МТ з довжинами $l < l_{\min}$ подібно, як і немодифікована теорія Гріффітса. Точка $L' = F/(Ea^2c)$ відповідає мінімуму повної потенціальної енергії з U_3 в формі (4.7), точка $L'' = \sqrt{b^3/2}/L'$ – максимуму $U = U_1 + U_2 + U_3$. Криві на Рис. 1

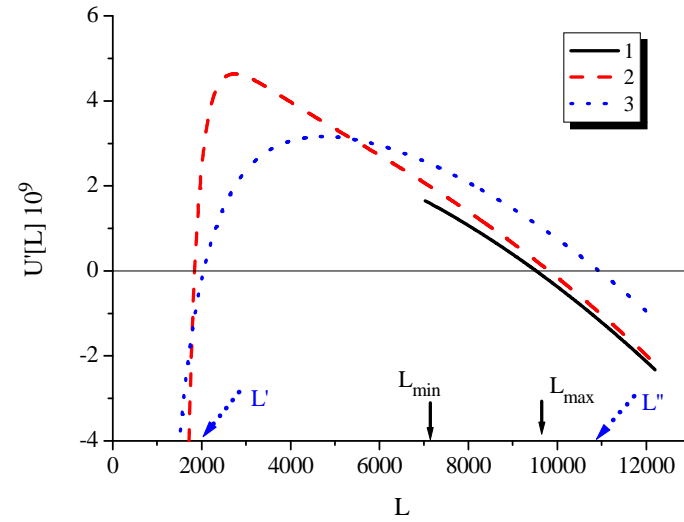


Рис. 1. Похідна потенціальної енергії МТ. Суцільними стрілками зображено мінімальну та максимальну довжини МТ, штрихованими – мінімальну та максимальну довжини МТ у випадку, коли складова потенціалу U_3 береться в формі (4.7).

приведені для такого значення сили F , яке відповідає безрозмірному параметру $\varepsilon = F/(Ea^2bc) = 0.02$, тобто можна стверджувати, що деформації в системі є малими.

Подальші наші міркування будуть повністю в дусі модифікованого підходу Голубовича [4,5]. Будемо вважати, що МТ з довжиною $L' < L < L_{\min}$ можуть заліковуватись з плином часу, і лише при досягненні МТ розмірів $L \geq L_{\min}$ можливий направлений ріст тріщини. Відповідно, час нуклеації МТ визначатиметься висотою потенціального бар'єру між точками L' та L_{\min} і у вищому порядку за параметром ε має наступний вигляд:

$$\tau_{nucl} = \tau_0 \exp \left[\frac{Ea^3}{k_B T} \sqrt[3]{\frac{3b^2}{4\varepsilon}} \right]. \quad (4.8)$$

Час росту МТ τ_{growth} також виражатиметься формулою (3.4), але з врахуванням профілю тріщини (4.5) ми отримаємо наступний

вираз:

$$\begin{aligned} \tau_{growth} &= \int_{L_{min}}^{L_{max}} \frac{dl}{v(l)} \approx \int_{L_{min}}^{L''} \frac{dl}{v(l)} \\ &\simeq \tau_{01} \exp \left[\frac{a^3 E}{k_B T} \sqrt[4]{b^3/2} \right] + \tau_{02} \exp \left[\frac{a^3 E}{k_B T} \frac{1}{\sqrt[6]{6}} b^{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt[3]{\varepsilon}} \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Як видно з останнього виразу, відношення енергій активації $\frac{E_{2,gr}}{E_{1,gr}} = \sqrt[12]{\frac{2}{9b} \frac{1}{\sqrt[3]{\varepsilon}}}$, тоді як модифікована теорія Гріффітса-Голубовича дає $E_{2,gr}/E_{1,gr} = 1/\varepsilon \gg 1$. Звідси випливає, що в нашому випадку час росту МТ визначається єдиною енергією активації $E_{2,gr}$, якщо безрозмірний параметр $\varepsilon \ll \frac{1}{\sqrt[3]{3}} \sqrt[4]{\frac{2}{b}}$. В протилежному випадку ріст МТ визначатиметься двома енергіями активації, а по мірі росту деформації вже домінуватиме $E_{1,gr}$. Однак в будь-якому випадку час нуклеації МТ не повинен визначатись висотою бар'єру $U(L_{max}) - U(L') \sim U(L_{max})$, як в теорії Гріффітса.

5. Висновки

Підіб'ємо підсумки аналітичних оцінок, проведених в даній роботі:

- Врахування міжчастинкової взаємодії між краями вершинної зони МТ приводить до появи загострених країв тріщини.
- На кривій потенціальної енергії, що описує поведінку системи, виникають як точка мінімуму, так і точка максимуму. При досягненні навантаженням певного порогового значення $F_c = Ea^2c \sqrt[4]{b^3/2}$ (що відповідає значенню $\varepsilon_c = 1/\sqrt[4]{2b}$) ці дві точки зливаються воедино і МТ починає руйнуватись миттєво.
- Навіть при досягненні МТ критичної довжини L_{max} протяжність вершинної зони є дуже великою, $s(L_{max}) \simeq \sqrt[4]{b^3/2} \gg 1$.
- Час росту МТ при достатньо малих деформаціях, як і час її нуклеації, визначається єдиною енергією активації, пропорційною $1/\sqrt[3]{\varepsilon}$. По мірі росту навантаження (але при умові, що воно залишається меншим критичного значення) ріст тріщини визначатимуть дві активаційні енергії.
- Термоактивована дифузія має двоякий вплив на мікротріщину: з одного боку, вона сприяє заліковуванню МТ, початкові

розміри якої були меншими за певну величину L_{min} . З іншого боку, вона понижає активаційний бар'єр та значно зменшує час до руйнування ЛПВМ.

Таким чином, врахування геометрії зразка, а також взаємодії між краями МТ веде до зменшення критичних значень напружень, при яких настає миттєве руйнування матеріалу ЛПВМ. Слід, однак, зауважити, що наші результати мають лише оціночний характер, оскільки для розрахунків енергій активації в якості профілю МТ ми брали її незбурене значення (4.5). У випадку, коли зовнішня сила F є малою, відтак – максимальне розкриття МТ незначне, відхилення точного розв'язку диференційного рівняння (4.4) від його нульового наближення (4.5) можуть сягати вже кількох десятків процентів. Це означає, що для отримання точних результатів на стадії виникнення МТ з дуже малим розкриттям (зародкових тріщин), треба чисельно розв'язувати рівн. (4.4) для кожного значення параметрів F , b , c , l і кожен раз розраховувати інтерполяційну функцію для потенціальної енергії МТ $U(F, l)$. Тим не менше, можна стверджувати, що наші оцінки будуть справедливими для розрахунку часів існування МТ на етапах їх активного розвитку, коли деформація $\varepsilon_0 \ll \varepsilon < \varepsilon_{cr} \ll 1$, де ε_0 – певне мінімальне значення.

Література

1. Ключников О.О. Современное состояние объекта “Укрытие“ и реализация международного проекта его преобразования в экологически безопасную систему (SIP). // Проблемы Чернобиля, 2002, вып. 11, с. 6-11.
2. Marliere C., Prades S., C'elarie F., Bonamy D., Guillot C., Bouchaud E. Crack fronts and damage in glass at the nanometer scale. // J. Phys.: Condens. Matter, 2003, vol. 15, p. S2377.
3. Baryakhtar V., Gonchar V., Zhydkov A., Zhydkov V. Radiation damages and self-sputtering of high-radioactive dielectrics: spontaneous emissuin of submicronic dust particles. // Condensed Matter Phys., 2002, vol.5, № 3(31), p. 449-471.
4. Golubovic L., Feng Sh. Rate of microcrack nucleation. // Phys. Rev. A., 1991, vol. 43, p. 5223-5227.
5. Golubovic L., Peredra A. Mechanism of time-delayed fractures. // Phys Rev. E., 1995, vol. 51, p. 2799-2804.
6. Santucci S., Vanel L., Guarino A., Scorretti R and Ciliberto S. Thermal activation of rupture and slow crack growth in a model of homo-

- geneous brittle materials. // *Europhysics Letters*, 2003, vol. 62, No. 3, p. 320-324.
7. Abraham F. How fast can cracks move? A research adventure in materials failure using millions of atoms and big computers. // *Adv. Phys.*, 2003, vol. 52, № 8, p.727-790.
 8. Ván P., Papenfuss C., Muschik W. Griffith cracks in the mesoscopic microcrack theory. // *Journ. Phys. A*, 2004, vol. 37, p. 5315-5328.
 9. Griffith A.A. The phenomena rupture and flow in solids. // *Phil. Trans. Roy. Soc. London A*, 1920, vol. 221, p. 163.
 10. Френкель Я.И. Теория обратимых и необратимых трещин в твердых телах. // *ЖЭТФ*, 1952, т. 22, вып. 11, стр.1857-1866.
 11. Дубинко В.И., Туркин А.А., Тур А.В., Яновский В.В. Диффузионное взаимодействие выделений новой фазы на произвольных расстояниях. // *ФММ*, 1989, т. 68, вып. 1, стр.21-28.
 12. Комаров Ф.Ф. Дефектообразование и трекообразование в твердых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий. // *Успехи физических наук*, 2003, том 173, №12, стр. 1287-1318.
 13. Мрыглод И.М., Фищук И.И., Зинец О.С., Павлович В.Н., Сугаков В.И., Моина А.Ф., Токарчук М.В., Омелян И.П. Разработка расчетно-аналитической модели поведения ТСМ (WBS A03 00000). // Отчет о научно-исследовательской работе, МНТЦ "Укрытие" НАН Украины, 161 стр.
 14. Politi A., Ciliberto S., Scoretti R. Failure time in the fiber-bundle model with thermal noise and disorder. // *Phys. Rev E.*, 2002, vol. 66, p. 026107.
 15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. "Наука", -М. 1965, 204 стр.
-

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Тарас Михайлович Верхоляк
Василь Васильович Ігнатюк

АНАЛІЗ НАЙПРОСТІШИХ МОДЕЛЕЙ ФОРМУВАННЯ МІКРОТРІЩИН

Роботу отримано 26 грудня 2005 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантово-статистичної теорії процесів каталізу

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені