[4] Шуваев А. Т., Хельмер Б. Ю., Любезнова Т. А. // ПТЭ. 1988. № 3. С. 234—237.
[5] Gubanov V. A., Erbudak M., Kurmaev E. Z. // Inorg. Chem. Lett. 1978. V. 14. P. 75—78.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
9 ноября 1989 г.

УДК 538.913

© Физика твердого тела, том 32, № 6, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 6, 1990

ПЕРКОЛЯЦИЯ ПО ПЛАКЕТАМ И РАЗРУШЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

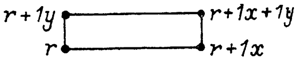
В. И. Марусяк, В. Е. Бойчук

Теоретическое исследование разрушения твердых тел под действием внешних сил имеет важное практическое значение и сопряжено с определенными трудностями модельного порядка. Начало разрушения означает появление [1] отдельных микротрещин в твердом теле. При дальнейшем развитии разрушения микротрещины объединяются в кластеры, и при появлении бесконечного кластера из микротрещин — макротрещины — происходит полное разрушение тела. Поэтому первый вопрос, который возникает в теории разрушения, — это при какой концентрации микротрещин возникает бесконечный кластер, т. е. происходит разрушение твердого тела. Ответу на этот вопрос и посвящена настоящая работа.

В работе [2] предложено описывать микротрещины плакетами, т. е. гранями элементарных ячеек. Поэтому, исходя из этой идеи, будем описывать процесс разрушения следующим образом. Пусть в кубической решетке, размеры элементарной ячейки которой равны размерам микротрещины, происходит диффузия некоторых частиц. Тогда, если в момент времени $t=0$ частица находилась в узле $n=0$, вероятность появления частицы в узле n и $t > 0$ обозначим через $G(n, t)$, которая является функцией Грина кинетического уравнения

$$\dot{G}(n, t) = \sum_j W_{nj}\,[G(j, t) - G(n, t)], \tag{1}$$

W_{nj} — вероятность перехода частицы в единицу времени из узла n в узел j' учитываем переходы только между ближайшими соседями. Принимая далее, что образование микротрещины соответствует вырванному плакету, будем случайным образом вырывать связи, конфигурации которых совпадают с плакетами. Вырвать связь означает положить вероятность перехода $W_{nj}=0$ [3]. Мы должны учесть плакеты во всех трех плоскостях XY, XZ, YZ. Для плакета в плоскости XY, например,



мы должны положить $W_{r,\,r+1x} = W_{r,\,r+1y} = W_{r+1y,\,r+1y+1x} = W_{r+1x,\,r+1y+1x} = 0$. Аналогично для других плоскостей. После этого уравнение (1) примет вид (мы явно выписали только вклад от плакетов в плоскости XY)

$$G(n, t) = \sum_j W_{nj}\,[G(j, t) - G(n, t)] + \{\Delta_x^{+} G(r, t)\,\Delta_x^{+}\delta_{n,\,r} + \Delta_x^{+} G(r, t)\,\Delta_y^{+}\delta_{n,\,r} + \Delta_x^{+} G(r+1x, t)\,\Delta_x^{+}\delta_{n,\,r+1y} + \Delta_y^{+} G(r+1x, t)\,\Delta_y^{+}\delta_{n,\,r+1x}\}, \tag{2}$$

где мы прибавили и отняли слагаемые, отвечающие вырванным связям. Более удобно провести преобразование Лапласа и ввести функцию Грина идеальной решетки $G^0(n, t)$. Тогда

$$G(n, s) = G^0(n, s) - W \sum_r \{\Delta_x^- G^0(n-r, s)\, \Delta_x^+ G(r, s) + \Delta_y^- G^0(n-r, s)\, \Delta_y^+ G(r, s) + \\ + \Delta_x^- G^0(n-r-1y, s)\, \Delta_x^+ G(r+1y, s) + \Delta_y^- G^0(n-r-1x, s)\, \Delta_y^+ G(r+1x, s)\}, \quad (3)$$

$\Delta_x^+(\Delta_x^-)$ — правая (левая) конечные разности

$$\Delta_x^{\pm} G(n) = \pm G(n \pm 1x) \mp G(n), \quad (4)$$

суммирование в (2), (3) проводится по всем вырванным плакетам.

Как видно из (3), функция Грина $G(n, s)$ выражается через значения этой же функции Грина только в точках разрыва. Образовав такие же выражения в левой части (3), получим относительно $\Delta_x^+ G(r)$ и других аналогичных величин систему линейных неоднородных уравнений. Тогда, если ввести обозначения

$$\sigma(r) = \begin{pmatrix} \Delta_x^+ G(r) \\ \Delta_y^+ G(r) \\ \Delta_x^+ G(r+1y) \\ \Delta_y^+ G(r+1x) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\Lambda(r) = (\Delta_x^- G(r),\ \Delta_y^- G(r),\ \Delta_x^- G(r+1y),\ \Delta_y^- G(r+1x)), \quad (6)$$

$$A(n-r) = \\ = \begin{pmatrix} \Delta_x^2 G(n-r) & \Delta_x^+\Delta_y^- G(n-r) & \Delta_x^2 G(n-r-1y) & \Delta_x^+\Delta_y^- G(n-r+1x) \\ \Delta_y^+\Delta_x^- G(n-r) & \Delta_y^2 G(n-r) & \Delta_y^+\Delta_x^- G(n-r+1y) & \Delta_y^2 G(n-r-1x) \\ \Delta_x^2 G(n-r+1y) & \Delta_x^+\Delta_y^- G(n-r+1y) & \Delta_x^2 G(n-r) & \Delta_x^+\Delta_y^- G(n-r-1x+1y) \\ \Delta_y^+\Delta_x^- G(n-r+1x) & \Delta_y^2 G(n-r+1x) & \Delta_y^+\Delta_x^- G(n-r-1y+1x) & \Delta_y^2 G(n-r) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

запишем для σ уравнение

$$\sigma_p = \sigma_p^0 - W \sum_r A(p-r)\, \sigma_r. \quad (8)$$

Решая уравнение (8) итерациями и представляя полученный ряд в виде стандартной диаграммной техники [4], после перехода к Фурье-преобразованию и усреднения по положениям разрывов в одноцентровом приближении запишем для массового оператора вклад от дефектов в плоскости XY

$$M^{xy}(k) = \Lambda(k)\,[1 + A(0)]^{-1}\, \sigma(k)\, cW, \quad (9)$$

где $\Lambda(k)$, $\sigma(k)$ — Фурье-преобразования $\Lambda(r)$ и $\sigma(r)$; c — концентрация дефектов на один узел. Вычисление обратной матрицы $[1+A(0)]^{-1}$ приводит к значению

$$[1 + A(0)]^{-1} = \begin{pmatrix} a & -b & d & b \\ -b & a & b & d \\ d & b & a & -b \\ b & d & -b & a \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где $a=1.621$, $b=0.295$, $d=0.031$. После этого явное вычисление массового оператора M^{xy} дает

$$M^{xy} = 2Wc\,[2a(\cos k_x + \cos k_y - 1) + 2d(2\cos k_x \cos k_y - \cos k_x - \cos k_y) + \\ + 4b(\cos k_x - 1)(\cos k_y - 1)]. \quad (11)$$

Совершенно аналогично можно выписать M^{xz} и M^{yz}. Тогда полный массовый оператор, как известно, в одноцентровом приближении от независимых взаимодействий равен сумме массовых операторов

$$M = M^{xy} + M^{xz} + M^{yz}. \quad (12)$$

Коэффициент диффузии связан с массовым оператором [3], вычисление дает при $s \to 0$

$$D_{xx} = 2W(1 - 4c(a+d)) = 2W(1 - 6.61c), \quad (13)$$

откуда видно, что при $c_{кр}=0.15$ $D_{xx}=0$, т. е. образуется бесконечный кластер из плакетов или макротрещина из микротрещин.

Для ориентированных веществ размеры микротрещины $a \sim 90$ Å [1], тогда в пересчете на единицу объема

$$c'_{кр}=a^{-3}c_{кр}=1.06 \cdot 10^{17}\ \text{см}^{-3}.$$

Таким образом, при концентрации микротрещин $c'_{кр}$ произойдут образование макротрещины и разрушение твердого тела.

В работе [5] исследована структура бесконечных кластеров, которые возникают при электрическом пробое и растрескивании, для двумерных решеток. Процесс роста трещин численно моделируется на ЭВМ с помощью уравнения Лапласа

$$\nabla (G \nabla u) = 0, \tag{14}$$

где u — перемещение, G — модуль упругости.

Для двумерной решетки микротрещина моделируется связью между соседними узлами.

В рассмотренной нами работе в трехмерном случае микротрещина моделируется гранью, а кинетическое уравнение (1) переходит при $s \to 0$ в уравнение Лапласа (14).

Необходимо также отметить, что при растяжении вдоль оси Z вещество может стать анизотропным, т. е. $W_x=W_y > W_z$. В этом случае в матрицу A (0) войдет еще функция от отношения W_x/W_z. Нетрудно заметить, что при учете анизотропии решетки критическая концентрация продольных микротрещин уменьшится, что приведет к уменьшению $c_{кр}$.

Список литературы

[1] Тамуж В. П., Куксенко В. С. Микромеханика разрушения полимерных материалов. Рига, 1978. 294 с.
[2] Приезжев В. Б., Терлецкий С. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 4. С. 125—128.
[3] Марусяк В. И., Фортуна В. В., Сильвеструк А. В. // УФЖ. 1987. Т. 32. № 5. С. 734—740.
[4] Марусяк В. И., Фортуна В. В., Сильвеструк А. В. // УФЖ. 1989. Т. 34. № 4. С. 125—128.
[5] Такаяси Х. // Фракталы в физике / Под ред. Я. Г. Синая и И. М. Халатникова. М.: Мир, 1988. С. 249—254.

Черновицкий государственный университет

Поступило в Редакцию
5 июля 1989 г.
В окончательной редакции
21 ноября 1989 г.

УДК 539.211+541.183.5

© Физика твердого тела, том 32, № 6, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 6, 1990

АДСОРБЦИЯ ДИСПРОЗИЯ НА ГРАНИ (112) КРИСТАЛЛА МОЛИБДЕНА

Ф. М. Гончар, В. К. Медведев, Т. П. Смерека, Г. В. Бабкин

Взаимодействие адсорбированных атомов через электронную систему подложки, как показано в ряде работ [1-7], сильно зависит как от химической природы подложки, так и от электронной структуры адатомов. В частности, в работах [1, 2] обнаружено, что структурные превращения в пленках лантана на однотипных гранях W (112) и Mo (112) существенно отличаются. Это связывалось с отличиями в косвенном взаимодействии адатомов La на указанных гранях, имеющих бороздчатую структуру,