

ЛИТЕРАТУРА

1. Карпинский Д. П., Орлов А. Н. Структура пластической зоны у вершины трещины // Эволюция дефектной структуры кристаллов (Моделирование на ЭВМ).— Л., 1984.
2. Kobayashi S., Ohr S. M. In situ fracture experiment in b. c. c. metals // Phil. Mag.— 1980.— V. A42.— P. 763.
3. Bilby B. A., Cottrell A. H., Swinden K. H. The spread of plastic yield from a notch // Proc. Roy. Soc. London.— 1963.— V. A272.— P. 304.
4. Chang S.-J., Ohr S. M. Dislocation-free zone models of fracture // J. Appl. Phys.— 1981.— V. 52.— P. 7174.
5. Ha K. F., Xu Y. B., Wang X. H., An Z. Z. A study on the dislocation-free zone ahead of the crack tips in bulk metallic single crystals // Acta met.— 1990.— V. 38, N 9.
6. Vitek V. Yielding on inclined planes at the tip of a crack loaded in uniform tension // J. Mech. Phys. Sol.— 1976.— V. 24.— P. 263.
7. Riedel H. Plastic yielding on inclined slip-planes at a crack tip // J. Mech. Phys. Sol.— 1976.— V. 24.— P. 277.
8. Lung C. W., Xiong L. J. The dislocation function in the plastic zone at a crack tip // Phys. state sol. (a).— 1983.— V. 77.— P. 81.
9. Weertman J. Crack tip blunting by dislocation pair creation and separation // Phil. Mag.— 1981.— V. A43, N 5.
10. Majumdar B. S., Burns S. J. Crack tip shielding — an elastic theory of dislocations and dislocation arrays near a sharp crack // Acta met.— 1981.— V. 29, N 4.
11. Thomson R. M., Sinclair J. E. Mechanics of crack screened by dislocation // Acta met.— 1982.— V. 30, N 7.
12. Витвицкий П. И., Панасюк В. В., Ярема С. Я. Пластические деформации в окрестности трещины и критерии разрушения // Пробл. прочности.— 1973.— № 2.
13. Владимиров В. П., Карпинский Д. П., Орлов А. П., Санников С. В. Моделирование на ЭВМ кинетики деформации в пластической зоне у вершины трещины // Пробл. прочности.— 1983.— № 12.
14. Westergaard H. M. Bearing pressures and cracks // J. Appl. Mech.— 1939.— V. 6, N 2.
15. Kröner E. Kontinuumtheorie der Versetzungen und Eigenspanungen.— Berlin: Springer-Verlag, 1958.
16. Райс Дж. Математические методы в механике разрушения // Разрушение.— М.: Мир, 1975.— Т. 2.
17. Spitzig W. A. Analysis of the plastic deformation in iron single crystals // Acta met.— 1970.— V. 18.— P. 1275.
18. Авербах Б. Л. Некоторые физические аспекты разрушения // Разрушение.— М.: Мир, 1973.— Т. 1.

г. Ростов-на-Дону

Поступила 22/IV 1992 г.

УДК 539.375

В. М. Корнев, Ю. В. Тихомиров

ДЕФОРМИРОВАНИЕ И ПОТЕРЯ УСТОЙЧИВОСТИ УЧАСТКА ЦЕПОЧКИ АТОМОВ В ВЕРШИНЕ ТРЕЩИНЫ

Известно, что изучение связанного с зарождением и распространением трещин разрушения твердых тел требует рассмотрения на атомном уровне процессов, протекающих в вершине трещины. При этом, несмотря на развитие в последнее время методов машинного моделирования, сохраняя свое значение простейшие атомистические модели трещин. Их достоинством является возможность детального аналитического рассмотрения при одновременном сохранении моделью основных черт, присущих реальному физическому объекту — хрупкой трещине в твердом теле.

Одна из таких моделей, предложенная Дж. Хпртом и примененная в [1] для описания распространения хрупкой трещины путем продвижения кинка, представляет собой линейную четырехатомную цепочку с взаимодействием ближайших соседей, средняя связь которой располагается перед вершиной трещины и разрывается при ее продвижении, а две крайние моделируют податливость кристаллической решетки. В [1]

© В. М. Корнев, Ю. В. Тихомиров, 1993

исследовано поведение цепочки при квазистатическом осуществлении полного цикла начального состояния — растяжение на бесконечную длину — возврат к начальному состоянию и получены результаты, касающиеся разрыва и залечивания средней атомной связи, величин преодолеваемых при этом энергетических барьеров, влияния ослабления средней связи. Цепочка предполагалась сохраняющей симметрию при любой степени растяжения.

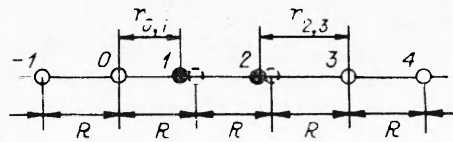


Рис. 1

В настоящей работе задача о квазистатическом растяжении атомной цепочки, расположенной в вершине трещины, рассматривается аналитически: 1) в симметричной постановке с учетом взаимодействия несоседних атомов, 2) без ограничения на симметрию в предположении взаимодействия только ближайших соседей. Результаты сравниваются с имеющимися в [1], делаются также некоторые выводы о применимости модели.

1. Постановка задачи. Рассмотрим при нуле градусов Кельвина линейную цепочку из достаточно большого (не меньше шести) числа однотипных атомов с точечными массами, допускающих перемещение только вдоль линии цепочки. Межатомное взаимодействие будем считать центральным парным, так что потенциальная энергия v взаимодействия двух атомов есть функция $v(r)$ расстояния r между ними. В начальном состоянии, когда воздействие внешних сил отсутствует, расстояния между атомами — ближайшими соседями составляют некоторые величины, которые, пренебрегая слабым граничным эффектом, считаем равными и обозначим r_0 .

Будем растягивать цепочку внешними силами, приложенными к крайним атомам, равными по абсолютной величине и противоположными по направлению. Тогда расстояния между атомами изменятся; предполагается, что эти изменения происходят достаточно медленно, так что цепочка (и каждый ее атом в отдельности) остается в состоянии квазистатического равновесия, т. е. минимума потенциальной энергии.

Пронумеруем атомы цепочки целыми числами так, чтобы атомы с номерами 1 и 2 оказались в ее середине, и будем считать, что при растяжении атомы с номерами $\dots, -1, 0, 3, 4, \dots$ всегда занимают положения, отвечающие идеальной структуре растянутой цепочки:

$$(1.1) \quad \dots = r_{-1,0} = (1/3)r_{0,3} = r_{3,4} = \dots$$

($r_{i,j}$ — расстояние между атомами i и j).

Пусть цепочка растянута до состояния, в котором длины связей в соотношении (1.1) равны величине R . Зафиксируем все атомы цепочки, кроме несоседних в перемещениях атомов 1 и 2, в определяемых значением R идеальных положениях. Тогда положения несоседних атомов полностью зависят от длин двух их связей, например $r_{0,1}$ и $r_{2,3}$ (рис. 1). Поскольку $r_{0,3} = 3R$, имеем

$$(1.2) \quad r_{1,2} = 3R - r_{0,1} - r_{2,3}.$$

Заметим, что другой подходящий выбор величин, например $r_{0,1}$ и $r_{1,2}$ или $r_{0,2}$ и $r_{1,3}$, не оказывает влияния на результаты.

Параметр R есть удобная характеристика растяжения цепочки, поскольку он связан с деформацией η атомной связи ближайших соседей соотношением $\eta = (R - r_0)/r_0$; сходная характеристика (длина четырехатомной цепочки, равная $3R$ в наших обозначениях) фигурирует в модели Хирга.

Полную потенциальную энергию W взаимодействия атомов цепочки можно представить в виде

$$(1.3) \quad W = W_c + W_d,$$

где $W_d = W_d(r_{0,1}; r_{2,3}; R)$ — энергия взаимодействия атомов 1 и 2 между собой и со своими соседями; $W_c = W_c(R)$ — энергия взаимодействия остальных (стесненных в перемещениях) атомов между собой. Что W_c зависит только от R , следует из (1.1). Таким образом, при фиксированном значении R полная потенциальная энергия W , а следовательно, и равновесие цепочки определяются величиной W_d .

Возьмем в качестве потенциала межатомного взаимодействия функцию Морса

$$(1.4) \quad v(r) = v_0 \{ \exp[-2\alpha(r - r_e)] - 2 \exp[-\alpha(r - r_e)] \}, \quad v_0 > 0.$$

Относительно возможности и области применения функции Морса к исследованиям прочности см., например, [2].

Следуя подходу [1], введем безразмерные переменные

$$(1.5) \quad \xi_1 = \exp[\alpha(r_{0,1} - r_e)], \quad \xi_2 = \exp[\alpha(r_{2,3} - r_e)], \quad \rho = \exp[\alpha(R - r_e)].$$

Формулы (1.5) устанавливают взаимно однозначное соответствие между величинами ξ_1 , ξ_2 , ρ и $r_{0,1}$, $r_{2,3}$, R , при этом ρ определяет растяжение цепочки, а ξ_1 , ξ_2 — ее конфигурацию, т. е. положения двух нестесненных атомов. Соотношение (1.3) в новых переменных примет вид

$$(1.6) \quad W(\xi_1, \xi_2, \rho) = W_c(\rho) + W_d(\xi_1, \xi_2, \rho),$$

где сохранены прежними обозначения функций.

Ответ на вопрос о поведении цепочки при квазистатически осуществляемом растяжении найдем, исследовав равновесие цепочки и определив ее равновесные конфигурации и их изменения в процессе растяжения.

2. Взаимодействие только ближайших соседей. При таком ограничении начальное расстояние r_0 равно r_e . Введем для функций W , W_c , W_d обозначения W^0 , W_c^0 , W_d^0 соответственно. Величина $W_d^0 \equiv W_d(r_{0,1}; r_{2,3}; R) = v(r_{0,1}) + v(r_{1,2}) + v(r_{2,3})$. Учитывая (1.2) и переходя к переменным (1.5), имеем

$$(2.1) \quad W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho) = v_0 (\xi_1^{-2} - 2\xi_1^{-1} + \xi_1^2 \xi_2^2 \rho^{-6} - 2\xi_1 \xi_2 \rho^{-3} + \xi_2^{-2} - 2\xi_2^{-1}).$$

Зафиксируем величину R , соответствующую ей ρ и тем самым положения атомов «идеальной» части цепочки. Тогда равновесная конфигурация цепочки определяется положениями равновесия атомов 1 и 2, а функция W^0 зависит только от ξ_1 , ξ_2 и равна $W_d^0 + \text{const}$. Поэтому уравнения равновесия цепочки $\partial W^0 / \partial \xi_1 = 0$, $\partial W^0 / \partial \xi_2 = 0$ принимают вид

$$(2.2) \quad \partial W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho) / \partial \xi_1 = 0, \quad \partial W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho) / \partial \xi_2 = 0,$$

фактически совпадая с уравнениями равновесия блока атомов 1 и 2.

Находя производные

$$\partial W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho) / \partial \xi_1 = 2v_0 \xi_1^{-3} \rho^{-6} (-\rho^6 + \xi_1 \rho^6 + \xi_1^4 \xi_2^2 - \xi_1^3 \xi_2 \rho^3),$$

$$\partial W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho) / \partial \xi_2 = 2v_0 \xi_2^{-3} \rho^{-6} (-\rho^6 + \xi_2 \rho^6 + \xi_1^2 \xi_2^4 - \xi_1 \xi_2^3 \rho^3)$$

и разлагая на множители выражения в скобках, заключаем, что система (2.2) равносильна совокупности следующих четырех систем уравнений с неизвестными ξ_1 , ξ_2 и параметром ρ :

$$(2.3a) \quad \xi_1^2 \xi_2 - \rho^3 = 0, \quad \xi_1 \xi_2^2 - \rho^3 = 0;$$

$$(2.3б) \quad \xi_1^2 \xi_2 + \rho^3 - \xi_1 \rho^3 = 0, \quad \xi_1 \xi_2^2 + \rho^3 - \xi_2 \rho^3 = 0;$$

$$(2.3в) \quad \xi_1^2 \xi_2 - \rho^3 = 0, \quad \xi_1 \xi_2^2 + \rho^3 - \xi_2 \rho^3 = 0;$$

$$(2.3г) \quad \xi_1^2 \xi_2 + \rho^3 - \xi_1 \rho^3 = 0, \quad \xi_1 \xi_2^2 - \rho^3 = 0.$$

Исключение параметра ρ из каждой системы в отдельности показывает, что решения первых двух из них должны обладать свойством

$$(2.4) \quad \xi_1 = \xi_2,$$

а последних двух — свойством

$$(2.5) \quad \xi_1 \xi_2 = \xi_1 + \xi_2.$$

Системы (2.3) имеют по одному решению, которые с учетом (2.4) и (2.5) можно записать в виде

$$(2.6a) \quad \{\xi_1 = \rho, \xi_2 = \rho\};$$

$$(2.6б) \quad \{\xi_1^2 (\xi_1 - 1)^{-1} = \rho^3, \xi_2^3 (\xi_2 - 1)^{-1} = \rho^3\};$$

$$(2.6в) \quad \{\xi_1^2 (\xi_1 - 1)^{-1} = \rho^3, \xi_2^3 (\xi_2 - 1)^{-2} = \rho^3\};$$

$$(2.6г) \quad \{\xi_1^3 (\xi_1 - 1)^{-2} = \rho^3, \xi_2^3 (\xi_2 - 1)^{-1} = \rho^3\}.$$

Подчеркнем, что формулы (2.6a)–(2.6г) — решения систем (2.3) при условиях (2.4) и (2.5), в противном случае этим формулам будут удовлетворять также некоторые посторонние значения ξ_1, ξ_2 , не являющиеся решениями систем (2.3).

Соотношения (2.6) вместе с (2.4), (2.5) определяют в пространстве $\{\xi_1, \xi_2, \rho\}$ четыре траектории равновесия цепочки (см. рис. 2), состоящие из стационарных точек функции потенциальной энергии W_c^0 и обозначаемые цифрами I–IV в соответствии с (2.6a)–(2.6г). Других стационарных точек у функции W_d^0 нет. Уравнения траекторий, будучи заданными (явно или неявно) в форме $\{\xi_i = \xi_i(\rho), i = 1, 2\}$, позволяют отыскать все возможные равновесные конфигурации цепочки при фиксированной величине ее растяжения.

Точки прямой (2.6a) отвечают «идеальной» структуре цепочки $r_{0,1} = r_{2,3} = R - r_e + \alpha^{-1} \ln \rho$ (из (1.5)), в том числе точка A (1, 1, 1) — начальному состоянию, поэтому траекторию равновесия I будем называть основной. Квасистатическому растяжению цепочки из начального состояния, т. е. увеличению ρ , отвечает движение по основной траектории от точки A в направлении A_2 до тех пор, пока «идеальное» состояние цепочки не станет неустойчивым, и тогда она перейдет (плавно или «хлопком» — нам предстоит выяснить) в устойчивое «неидеальное» состояние, определяемое точкой на одной из траекторий равновесия II–IV,

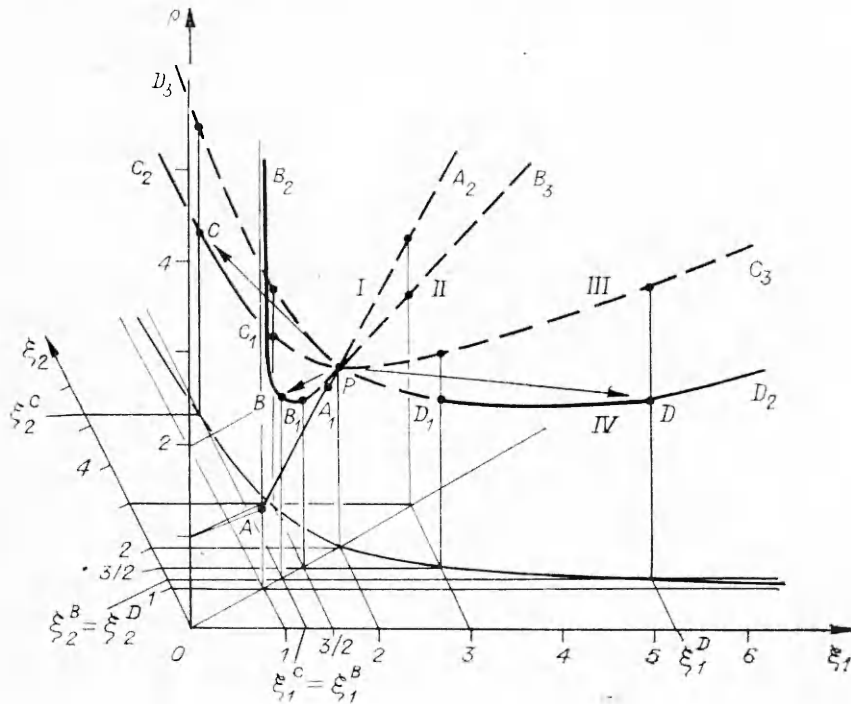


Рис. 2

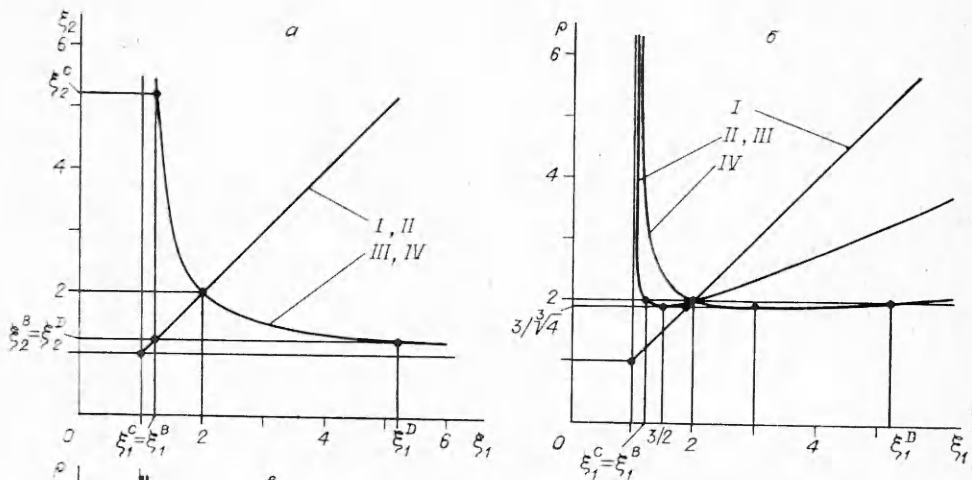


Рис. 3

называемых поэтому вторичными. Из формул (2.6) следует, что для точек траектории II «неидеальность» характеризуется соотношением длин связей $r_{0,1} = r_{2,3} \neq R$, для точек траекторий III и IV $r_{0,1} \neq r_{2,3}$ и не равны R ; исключением является общая для всех четырех траекторий точка (2.7) $P(2, 2, 2)$

— единственная точка их пересечения (см. рис. 2).

Рассмотрим взаимное расположение траекторий в пространстве $\{\xi_1, \xi_2, \rho\}$ (рис. 2, 3). Из (2.4) и (2.5) следует, что траектории I, II располагаются в плоскости симметрии $\{\xi_1 = \xi_2\}$, а III и IV принадлежат задаваемой уравнением (2.5) цилиндрической поверхности с образующими, параллельными оси ρ , пересекающей плоскость $\{\xi_1 = \xi_2\}$ по прямой $\{\xi_1 = \xi_2 = 2\}$. Далее, в (2.6б), (2.6в) ξ_1 и ρ связаны одним и тем же соотношением

$$(2.8) \quad \xi_1^3 (\xi_1 - 1)^{-1} = \rho^3,$$

вследствие чего траектории II и III принадлежат определяемой формулой (2.8) цилиндрической поверхности с образующими, параллельными оси ξ_2 , и их проекции на плоскость $\{\xi_2 = \text{const}\}$ совпадают. Аналогичным образом траектории II и IV принадлежат цилиндрической поверхности

$$(2.9) \quad \xi_2^3 (\xi_2 - 1)^{-1} = \rho^3$$

с образующими, параллельными оси ξ_1 . При этом траектория II является пересечением поверхностей (2.8), (2.9) и плоскости симметрии $\{\xi_1 = \xi_2\}$.

Из двух уравнений, задающих каждую вторичную траекторию, по крайней мере одно имеет вид $x^3 - \rho^3 x + \rho^3 = 0$ (где на месте x стоит ξ_1 либо ξ_2). При $\rho \geq 3/\sqrt[3]{4}$ у этого уравнения есть два вещественных положительных корня:

$$(2.10) \quad x_{(1)} = 2\sqrt[3]{\rho^3/3} \cos(\varphi/3), \quad x_{(2)} = 2\sqrt[3]{\rho^3/3} \cos((\varphi + 4\pi)/3).$$

Здесь $\varphi = \arccos\left(-\left(\frac{27}{4\rho^3}\right)^{1/2}\right)$, причем при $\rho = 3/\sqrt[3]{4}$ $x_{(1)} = x_{(2)} = 3/2$.

При $\rho < 3/\sqrt[3]{4}$ уравнение положительных вещественных корней

не имеет. Поэтому во всех точках вторичных траекторий $\rho \geq 3/\sqrt[3]{4}$ и равенство достигается в самых «нижних» точках

$$(2.11) \quad B_1(3/2, 3/2, 3/\sqrt[3]{4}), C_1(3/2, 3, 3/\sqrt[3]{4}), D_1(3, 3/2, 3/\sqrt[3]{4})$$

траекторий *II—IV* соответственно.

Точки (2.11) делят «свои» траектории на две бесконечные ветви (изображаемые на рис. 2 сплошными и штриховыми линиями). Задание значения ρ , большего $3/\sqrt[3]{4}$, определяет на каждой из вторичных траекторий ровно две точки (это следует из (2.5), (2.6) и (2.10)), которые принадлежат разным ветвям, поскольку один из корней (2.10) тогда обязательно меньше $3/2$. Чтобы из двух точек выбрать одну, требуется указать дополнительно значение какой-либо из координат, например ξ_1 , задав тем самым ветвь.

Точки кривых *I—IV*, представляя собой полную совокупность стационарных точек функции потенциальной энергии $W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho)$, определяют все возможные положения равновесия цепочки. Устойчивость каждого из них проверим следующим образом. При фиксированном значении переменной ρ функция энергии $W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho)$ становится функцией двух переменных ξ_1, ξ_2 : $W_d^0|_{\rho=\text{const}} \equiv W_d^0(\xi_1, \xi_2)$. Экстремум функции $W_d^0(\xi_1, \xi_2)$ может достигаться только в ее стационарных точках, а существование и тип экстремума определяются знаками выражений

$$(2.12) \quad (W_d^0)_{11}(W_d^0)_{22} - [(W_d^0)_{12}]^2 \text{ и } (W_d^0)_{11}$$

согласно известным правилам. Здесь

$$\begin{aligned} (W_d^0)_{11} &\equiv \partial^2 W_d^0 / \partial \xi_1^2 = 2v_0 \xi_1^{-4} \rho^{-6} [(3 - 2\xi_1) \rho^6 + \xi_1^4 \xi_2^2]; \\ (W_d^0)_{22} &\equiv \partial^2 W_d^0 / \partial \xi_2^2 = 2v_0 \xi_2^{-4} \rho^{-6} [(3 - 2\xi_2) \rho^6 + \xi_1^2 \xi_2^4]; \\ (W_d^0)_{12} &\equiv \partial^2 W_d^0 / \partial \xi_1 \partial \xi_2 = \partial^2 W_d^0 / \partial \xi_2 \partial \xi_1 = 2v_0 \rho^{-6} (2\xi_1 \xi_2 - \rho^3). \end{aligned}$$

Очевидно, что стационарными точками функции $W_d^0(\xi_1, \xi_2)$ являются точки пересечения траекторий *I—IV* с соответствующей плоскостью $\{\rho = \text{const}\}$ и только они. Отыскать их координаты из уравнений (2.6) (что можно сделать, поскольку $\rho = \text{const}$) и подставив во вторые производные, определяем знаки выражений (2.12). Заставляя ρ пробежать все возможные значения, получим информацию о существовании и типе экстремума функции $W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho)$ в каждой точке траекторий равновесия *I—IV*. Информация эта сведена в таблицу. Некоторая сложность заключается в том, что соответствие ρ точкам вторичных траекторий не является однозначным. Однако оно будет таковым для точек определенных выше ветвей этих траекторий, в связи с чем в таблице потребовалось указание значений ξ_1 наряду с ρ . Отметим, что исследование с помощью вторых производных не дает ответа на вопрос о существовании экстремума в точках *P, B₁, C₁* и *D₁*. Однако в отсутствие экстремума функции W_d^0 в этих точках легко убедиться, если для каждой из них отыскать хотя бы одну проходящую через нее кривую, лежащую в плоскости $\{\rho = \text{const}\}$ и такую, что при движении по этой кривой функция W_d^0 имеет в рассматриваемой точке перегиб. Для точек *P* и *B₁* такой кривой будет прямая $\{\xi_1 = \xi_2\}$, а для точек *C₁* и *D₁* — кривая (2.5).

Данные таблицы показывают, что точки одной из двух ветвей, на которые поделена каждая вторичная траектория равновесия, отвечают минимумам W_d^0 , а в точках другой, включая и точку «деления» с индексом 1, экстремума у функции W_d^0 нет. Поэтому первую из указанных ветвей в дальнейшем станем называть устойчивой, а вторую — неустойчивой. На рис. 2 они изображены, как обычно принято, сплошными и штриховыми линиями.

Траектория	ρ	ξ_1	Участок, ветвь траектории или точка	Наличие и тип экстремума
I	$1 \leq \rho < 2$		От A (включительно) до P	Минимумы
	2		P	Нет экстремума
	$\rho > 2$		От P в направлении A_2	Максимумы
II	$3/\sqrt[3]{4}$	3/2	B_1	Нет экстремума
	$\rho > 3/\sqrt[3]{4}$	$\xi_1 < 3/2$	B_1B_2	Минимумы
		$\xi_1 > 3/2$	B_1B_3	Нет экстремума
III	$3/\sqrt[3]{4}$	3/2	C_1	» »
	$\rho > 3/\sqrt[3]{4}$	$\xi_1 < 3/2$	C_1C_2	Минимумы
		$\xi_1 > 3/2$	C_1C_3	Нет экстремума
IV	$3/\sqrt[3]{4}$	3	D_1	» »
	$\rho > 3/\sqrt[3]{4}$	$\xi_1 < 3$	D_1D_3	» »
		$\xi_1 > 3$	D_1D_2	Минимумы

З а м е ч а н и е. Далее для краткости будем иногда писать «положение (состояние) равновесия на траектории» вместо «положение (состояние) равновесия, которому соответствует точка на траектории».

Используя данные таблицы, проследим за тем, как влияет изменение параметра растяжения ρ на число и устойчивость возможных положений равновесия цепочки. Прежде всего отметим, что для каждого значения ρ из рассматриваемого диапазона $\rho \geq 1$ существует положение равновесия на основной траектории, которое тоже назовем основным. Оно устойчиво, если $1 \leq \rho < 2$, и неустойчиво, если $\rho \geq 2$. При $1 \leq \rho < 3/\sqrt[3]{4}$ других положений равновесия у цепочки нет, при $\rho = 3/\sqrt[3]{4}$ существуют еще три неустойчивых положения в точках B_1 , C_1 и D_1 вторичных траекторий. Если $3/\sqrt[3]{4} < \rho < 2$, то возможных состояний равновесия цепочки семь: основное и по одному на каждой из шести ветвей трех вторичных траекторий. Поскольку из шести ветвей устойчивых только три, при $3/\sqrt[3]{4} < \rho < 2$ существуют четыре устойчивых положения равновесия и три неустойчивых.

При $\rho = 2$ картина вновь меняется. Три неустойчивых равновесных состояния, располагающихся на вторичных траекториях, сливаются в точке P с основным, образуя неустойчивое состояние равновесия на основной траектории, в то время как три устойчивых вторичных положения сохраняются: точки $B(1,236; 1,236; 2)$, $C(1,236; 5,236; 2)$ и $D(5,236; 1,236; 2)$. Наконец, при $\rho > 2$ положений равновесия вновь становится семь: неустойчивое основное плюс одно устойчивое и одно неустойчивое на каждой из трех вторичных траекторий (в соответствии с устойчивостью их ветвей).

Установим еще один факт относительно поведения функции энергии W_d^0 в точках траекторий равновесия (2.6). Пусть при заданной величине $\rho = \rho_\Phi \geq 3/\sqrt[3]{4}$ точки $(\alpha_1, \alpha_2, \rho_\Phi)$, $(\beta_1, \beta_2, \rho_\Phi)$, $(\gamma_1, \gamma_2, \rho_\Phi)$ принадлежат устойчивым ветвям траекторий II—IV соответственно. Тогда из (2.5), (2.6), (2.8), (2.9) следует, что $\alpha_1 = \alpha_2$, $\alpha_1 = \beta_1$, $\alpha_2 = \gamma_2$, и легко показать, что разности

$$W_d^0(\beta_1, \beta_2, \rho_\Phi) - W_d^0(\alpha_1, \alpha_2, \rho_\Phi) \text{ и } W_d^0(\gamma_1, \gamma_2, \rho_\Phi) - W_d^0(\alpha_1, \alpha_2, \rho_\Phi) \uparrow$$

равны нулю, т. е. при фиксированном ρ значения W_d^0 (а значит, и W^0) в отвечающих точках на устойчивых ветвях вторичных траекторий совпадают, в частности, $W_d^0|_B = W_d^0|_C = W_d^0|_D \approx -2,2725v_0$. То же самое справедливо и для точек неустойчивых ветвей, а также для точек B_1, C_1 и D_1 , в которых $W_d^0 = [2^{4/3}/3 - 2^{5/3}]v_0 \approx -2,3349v_0$. В точке P $W_d^0|_P = -2,25v_0$.

Построим общую картину отклика цепочки на растяжение, степень которого будем, как и прежде, задавать с помощью параметра ρ .

1. $\rho = 1$. Воздействие внешних сил отсутствует, цепочка находится в начальном состоянии устойчивого равновесия (точка A) с равными длинами связей ближайших соседей: $r_{0,1} = r_{2,3} = R = r_0 = r_e$.

2. $1 < \rho < 3/\sqrt[3]{4}$. Под влиянием прикладываемой нагрузки цепочка растягивается, сохраняя идеальную структуру в силу единственности и устойчивости основного равновесного состояния. В пространстве $\{\xi_1, \xi_2, \rho\}$ это соответствует движению вдоль основной траектории от точки A до точки $A_1(3/\sqrt[3]{4}, 3/\sqrt[3]{4}, 3/\sqrt[3]{4})$.

3. $\rho = 3/\sqrt[3]{4}$. Цепочка находится в устойчивом положении равновесия A_1 , поскольку три других возможных равновесных состояния B_1, C_1 и D_1 на вторичных траекториях неустойчивы.

4. $3/\sqrt[3]{4} < \rho < 2$. Для каждого значения ρ в этом диапазоне существуют четыре различные устойчивые равновесные конфигурации цепочки, в которых функция W_d^0 имеет локальные минимумы.

Однако, если не преодолен энергетический барьер, отделяющий «основной» минимум от «вторичных», цепочка продолжает оставаться «идеальной» вплоть до значения $\rho = 2$, что отвечает движению от A_1 до P вдоль основной траектории равновесия.

5. $\rho = 2$. Критический момент растяжения — точка P потери устойчивости «идеальной» конфигурации цепочки. Функция W_d^0 имеет в точке P перегиб, барьер, отделявший «основное» положение равновесия от «вторичных», теперь отсутствует, и цепочка, понижая энергию W_d^0 (а следовательно, и W^0) на величину $0,0225v_0$, «хлопком» переходит из «идеальной» в одну из трех возможных «неидеальных» конфигураций (точки B, C и D на вторичных траекториях). Значения энергии в них одинаковы (см. выше), поэтому сказать с определенностью, какую именно конфигурацию приобретет цепочка, в рамках настоящего рассмотрения не представляется возможным; это зависит, по-видимому, от некоторых дополнительных ее свойств.

6. $\rho > 2$. При дальнейшем растяжении цепочка сохраняет устойчивую «неидеальную» конфигурацию, «выбранную» ею при переходе на одну из вторичных траекторий, что соответствует движению точки по устойчивой ветви этой траектории в направлении увеличения ρ .

Будем считать, что смены конфигурации цепочки путем преодоления некоторого энергетического барьера не происходит в течение всего процесса растяжения. Тогда существуют три варианта поведения цепочки при монотонном растяжении, определяемых следующей схемой:

$$(2.13) \quad A \xrightarrow{\text{траектория } I} P \xrightarrow{\text{«хлопок»}} \begin{cases} B \xrightarrow{\text{траектория II}} B_2 \text{ и далее} \\ \text{либо} \\ C \xrightarrow{\text{траектория III}} C_2 \text{ и далее} \\ \text{либо} \\ D \xrightarrow{\text{траектория IV}} D_2 \text{ и далее} \end{cases} \quad \begin{matrix} (V1) \\ (V2), \\ (V3). \end{matrix}$$

Штриховая стрелка на схеме означает плавный переход от точки к точке вдоль указанной траектории.

Проследим за изменениями в конфигурации цепочки при следовании каждому из вариантов (V1)–(V3). Из формул (1.1), (1.2) и (1.5) имеем выражения межатомных расстояний в растянутой цепочке через величины ξ_1 , ξ_2 , ρ :

$$(2.14) \quad \begin{aligned} \dots = r_{-1,0} = (1/3)r_{0,3} = r_{3,4} = \dots = R = r_e + \alpha^{-1} \ln \rho, \\ r_{0,1} = r_e + \alpha^{-1} \ln \xi_1 = R + \alpha^{-1} \ln(\xi_1 \rho^{-1}), \\ r_{1,2} = r_e + \alpha^{-1} \ln(\xi_1^{-1} \xi_2^{-1} \rho^3) = R + \alpha^{-1} \ln(\xi_1^{-1} \xi_2^{-1} \rho^2), \\ r_{2,3} = r_e + \alpha^{-1} \ln \xi_2 = R + \alpha^{-1} \ln(\xi_2 \rho^{-1}). \end{aligned}$$

Как следует из схемы (2.13) и уравнений (2.6), вначале связи между ближайшими соседями растягиваются одинаково: $\dots = r_{-1,0} = r_{0,1} = r_{1,2} = r_{2,3} = r_{3,4} = \dots = R$. Так происходит вплоть до критического момента растяжения, когда

$$(2.15) \quad \rho = \rho_* = 2, \quad R = R_* = r_e + \alpha^{-1} \ln \rho_* \approx r_e + 0,6931\alpha^{-1}.$$

По его достижении длины $r_{0,1}$, $r_{1,2}$, $r_{2,3}$ связей нестесненных атомов претерпевают резкие изменения согласно схеме (2.13). Используя соотношения (2.14), данные таблицы и графики рис. 2, 3, рассмотрим по очереди приведенные на схеме варианты.

Вариант (V1). Из (2.6б) следует

$$(2.16) \quad \begin{aligned} r_{0,1} = r_{2,3} = R + (1/3)\alpha^{-1} \ln(\xi_1 - 1) < R, \\ r_{1,2} = R - (2/3)\alpha^{-1} \ln(\xi_1 - 1) > R, \end{aligned}$$

так как $\xi_1 < 3/2$. В частности, в точке B

$$\begin{aligned} r_{0,1}^B = r_{2,3}^B \approx R_* - 0,4812\alpha^{-1} \approx r_e + 0,2119\alpha^{-1}, \\ r_{1,2}^B \approx R_* + 0,9624\alpha^{-1} \approx r_e + 1,6556\alpha^{-1}. \end{aligned}$$

С увеличением ρ расстояние $r_{1,2}$ растет, расстояния $r_{0,1} = r_{2,3}$ сокращаются, так что при $\rho \rightarrow \infty$ $r_{1,2} \rightarrow \infty$, $r_{0,1} = r_{2,3} \rightarrow r_e$.

Вариант (V2). Из (2.5) и (2.6в) вытекает

$$(2.17) \quad \begin{aligned} r_{0,1} = r_{1,2} = R + (1/3)\alpha^{-1} \ln(\xi_1 - 1) < R, \\ r_{2,3} = R - (2/3)\alpha^{-1} \ln(\xi_1 - 1) > R, \end{aligned}$$

так как $\xi_1 < 3/2$. В частности, в точке C

$$\begin{aligned} r_{0,1}^C = r_{1,2}^C \approx R_* - 0,4812\alpha^{-1} \approx r_e + 0,2119\alpha^{-1}, \\ r_{2,3}^C \approx R_* + 0,9624\alpha^{-1} \approx r_e + 1,6556\alpha^{-1}. \end{aligned}$$

С увеличением ρ расстояние $r_{2,3}$ растет, расстояния $r_{0,1} = r_{1,2}$ сокращаются, так что при $\rho \rightarrow \infty$ $r_{2,3} \rightarrow \infty$, $r_{0,1} = r_{1,2} \rightarrow r_e$.

Вариант (V3). Из (2.5) и (2.6г) следует

$$(2.18) \quad \begin{aligned} r_{0,1} = R + (2/3)\alpha^{-1} \ln(\xi_1 - 1) > R, \\ r_{1,2} = r_{2,3} = R - (1/3)\alpha^{-1} \ln(\xi_1 - 1) < R, \end{aligned}$$

так как $\xi_1 > 3$. В частности, в точке D

$$\begin{aligned} r_{0,1}^D \approx R_* + 0,9624\alpha^{-1} \approx r_e + 1,6556\alpha^{-1}, \\ r_{1,2}^D = r_{2,3}^D \approx R_* - 0,4812\alpha^{-1} \approx r_e + 0,2119\alpha^{-1}. \end{aligned}$$

С увеличением ρ расстояние $r_{0,1}$ растет, расстояния $r_{1,2} = r_{2,3}$ сокращаются, так что при $\rho \rightarrow \infty$ $r_{0,1} \rightarrow \infty$, $r_{1,2} = r_{2,3} \rightarrow r_e$.

Проведенный анализ показывает, что: а) критическое значение R_* совпадает с критической длиной связи в изолированной двухатомной молекуле с взаимодействием по закону (1.4) (находимой из условия $d^2v/dr^2 = 0$ максимальной силы взаимодействия); б) по достижении

этой критической величины из трех межатомных связей 0—1, 1—2, 2—3, которые «свободны» в выборе своей длины, две укорачиваются, а третья растягивается скачком до длины сверхкритической, что в условиях нашей задачи может быть интерпретировано как ее разрыв; в) новые длины этих трех связей в количественном отношении не зависят от избранного цепочкой варианта поведения (это следует из (2.16)–(2.18) и хорошо иллюстрируется на примере точек B , C и D), как и длины остальных связей, они определяются только степенью растяжения цепочки; г) при дальнейшем монотонном растяжении цепочки других качественных изменений в ее состоянии, подобных описанному в пункте б, не происходит.

3. Учет взаимодействия вторых соседей. В этом случае слагаемое W_d в формуле (1.3) будет включать в себя кроме энергии W_d^0 сумму $v(r_{-1,1}) + v(r_{1,3}) + v(r_{0,2}) + v(r_{2,4})$ вкладов взаимодействия атомов 1 и 2 со своими вторыми соседями. Из (1.1) и (1.2) следует, что $r_{-1,1} = R + r_{0,1}$, $r_{1,3} = 3R - r_{0,1}$, $r_{0,2} = 3R - r_{2,3}$, $r_{2,4} = R + r_{2,3}$. Переходя к переменным (1.5), получаем

$$(3.1) \quad W_d(\xi_1, \xi_2, \rho) = W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho) + \varepsilon^2 \xi_1^{-2} \rho^{-2} - 2\varepsilon \xi_1^{-1} \rho^{-1} + \varepsilon^2 \xi_1^2 \rho^{-6} - \\ - 2\varepsilon \xi_1 \rho^{-3} + \varepsilon^2 \xi_2^2 \rho^{-6} - 2\varepsilon \xi_2 \rho^{-3} + \varepsilon^2 \xi_2^{-2} \rho^{-2} - 2\varepsilon \xi_2^{-1} \rho^{-1},$$

где $W_d^0(\xi_1, \xi_2, \rho)$ определяется формулой (2.1), а

$$(3.2) \quad \varepsilon = \exp(-\alpha r_e)$$

есть безразмерная малая величина, зависящая от параметров потенциала Морса (например, по данным [3], для некоторых металлов $1/88 < \varepsilon < 1/23$). Отметим, что учет взаимодействия вторых соседей приводит к изменению энергии W_d на малую величину порядка ε : $W_d = W_d^0 + \varepsilon O(W_d^0)$. Аналогично этому $\bar{W}_c = \bar{W}_c^0 + \varepsilon O(\bar{W}_c^0)$, вследствие чего полная потенциальная энергия цепочки $W = W^0 + \varepsilon O(W^0)$. Кроме того, формула (3.1) хорошо иллюстрирует допустимость пренебрежения взаимным отталкиванием атомов по сравнению с их притяжением на больших межатомных расстояниях: соответствующие члены имеют разный порядок по ε .

Будем пренебрегать в дальнейшем членами, содержащими ε в степени выше первой. Как и в п. 2, зафиксируем значение ρ и, составив уравнения равновесия цепочки, придем к системе уравнений относительно ξ_1, ξ_2 :

$$-\rho^6 + \xi_1 \rho^6 + \xi_1^4 \xi_2^2 - \xi_1^3 \xi_2 \rho^3 + \varepsilon \xi_1 \rho^5 - \varepsilon \xi_1^3 \rho^3 = 0, \\ -\rho^6 + \xi_2 \rho^6 + \xi_1^2 \xi_2^4 - \xi_1 \xi_2^3 \rho^3 + \varepsilon \xi_2 \rho^5 - \varepsilon \xi_2^3 \rho^3 = 0.$$

Преобразуем ее к виду

$$(3.3) \quad (\xi_1^2 \xi_2 - \rho^3)(\xi_1^2 \xi_2 + \rho^3 - \xi_1 \rho^3) - \varepsilon \xi_1 \rho^3 (\xi_1^2 - \rho^2) = 0, \\ (\xi_1 \xi_2^2 - \rho^3)(\xi_1 \xi_2^2 + \rho^3 - \xi_2 \rho^3) - \varepsilon \xi_2 \rho^3 (\xi_2^2 - \rho^2) = 0.$$

Заметим, что отбрасывание в системе (3.3) членов, содержащих ε , приводит ее к совокупности систем (2.3), как и следовало ожидать.

Одно решение (3.3) очевидно:

$$(3.4) \quad \{\xi_1 = \rho, \xi_2 = \rho\},$$

однако получить остальные подобным образом не удастся. Нелинейность уравнений системы наводит на мысль применить здесь методы теории ветвления решений нелинейных уравнений [4]. В самом деле, анализ случая взаимодействия ближайших соседей показал, что главным в изучении равновесия цепочки является определение точек и форм потери устойчивости основной траектории равновесия, т. е. перехода от некоторого «основного» решения уравнений равновесия ко «вторичным».

Общее исследование, учитывающее несимметричные формы равновесия цепочки ($r_{0,1} \neq r_{2,3}$), требует решения сложной задачи теории вет-

вления для системы из двух уравнений с двумя неизвестными ξ_1, ξ_2 и двумя параметрами ρ, ε , поэтому ниже рассматривается только случай симметрии $r_{0,1} = r_{2,3}$.

При таком условии $\xi_1 = \xi_2 = \xi$ и два уравнения равновесия цепочки сводятся к одному:

$$(3.5) \quad F(\xi, \varepsilon, \rho) = (\xi - 1)\rho^6 + \xi^6 - \xi^4\rho^3 + \varepsilon\xi\rho^5 - \varepsilon\xi^3\rho^3 = 0.$$

Вещественная функция F от вещественных аргументов непрерывна и имеет непрерывные частные производные любого порядка по всем аргументам. Раскладывая левую часть (3.5) на множители: $F(\xi, \varepsilon, \rho) = (\xi - \rho)F_1(\xi, \varepsilon, \rho)$, где

$$(3.6) \quad F_1(\xi, \varepsilon, \rho) = (\xi^2 + \xi\rho + \rho^2)(\xi^3 - \xi\rho^3 + \rho^3) - \varepsilon\xi\rho^3(\xi + \rho),$$

имеем очевидное решение уравнения (3.5)

$$(3.7) \quad \xi = \rho,$$

существование которого следует также из (3.4). Решение (3.7) соответствует «идеальной» конфигурации цепочки, и, как и в п. 2, будем называть его основным. Точка (ρ_v, ρ_v) будет точкой ветвления основного решения (3.7), если существует хотя бы одно решение

$$(3.8) \quad \xi = \xi(\varepsilon, \rho)$$

уравнения $F_1(\xi, \varepsilon, \rho) = 0$, удовлетворяющее условию $\rho_v = \xi(\varepsilon, \rho_v)$ и определенное в некоторой окрестности точки (ρ_v, ρ_v) . Геометрически это означает, что кривые (3.7) и (3.8), лежащие в плоскости $\{\xi, \rho\}$, пересекаются в точке (ρ_v, ρ_v) .

В соответствии с общей теорией (см. [4], с. 13, 26) условием существования таких точек является равенство в них нулю производной $\partial F / \partial \xi$. Подставляя в уравнение $\partial F(\xi, \varepsilon, \rho) / \partial \xi = 0$ соотношение $\xi = \rho$, находим координаты точки ветвления (с точностью до величины первого порядка по ε)

$$(3.9) \quad \rho = 2 - (2/3)\varepsilon.$$

Для отыскания решений (3.8), ответвляющихся от основного в точке (ρ_v, ρ_v) , сделаем в (3.6) замену $\xi = \zeta + \rho_v, \rho = \lambda + \rho_v$ и представим выражение $F_1(\xi, \varepsilon, \lambda)$ в виде полинома от переменных ζ и λ с коэффициентами, зависящими от ε : $F_1(\xi, \varepsilon, \lambda) = \sum_{i,j} F_{ij}^1(\varepsilon) \zeta^i \lambda^j$. Применяя к уравнению $F_1(\xi, \varepsilon, \lambda) = 0$ метод диаграммы Ньютона [4], получим в окрестности точки $(\zeta, \lambda) = (0, 0)$ его решение в виде сходящегося ряда по целым положительным степеням λ и с коэффициентами, зависящими от ε , в которых в соответствии с принятым упрощением оставим только величины порядка по ε не выше первого: $\xi(\varepsilon, \lambda) = (3 - (4/3)\varepsilon)\lambda + o(\lambda)$. Выполнив обратную замену, находим в окрестности точки (ρ_v, ρ_v) решение

$$(3.10) \quad \xi(\varepsilon, \rho) = \rho_v + (3 - (4/3)\varepsilon)(\rho - \rho_v) + o(\rho - \rho_v)$$

уравнения равновесия (3.5), ответвляющееся от основного в точке (ρ_v, ρ_v) и представленное в виде сходящегося ряда по целым положительным степеням $\rho - \rho_v$. Кроме (3.7) и (3.10), других решений, проходящих через точку (ρ_v, ρ_v) , уравнение (3.5) не имеет.

Нетрудно показать, что в пространстве $\{\xi_1, \xi_2, \rho\}$ вдоль основной траектории равновесия цепочки $\{\xi_1 = \xi_2 = \rho\}$, определяемой соотношением (3.4) (или (3.7)), функция W_d (без членов с ε^2) имеет при $\rho < \rho_v$ минимумы, а при $\rho > \rho_v$ — максимумы и перегиб в точке (ρ_v, ρ_v, ρ_v) — точке потери устойчивости «идеальной» конфигурации цепочки и перехода ее в «неидеальную», но симметричную (так как $r_{0,1} = r_{2,3}$) конфигурацию, определяемую в окрестности этой точки формулой (3.10), с учетом того, что $\xi_1 = \xi_2 = \xi$.

В п. 2 получено, что при взаимодействии ближайших соседей симметричные формы равновесия цепочки задаются соотношениями (2.6а),

(2.66), а координаты точки ветвления соответствующих траекторий — формулой (2.7). С помощью метода диаграммы Ньютона зависимость (2.66) может быть представлена в окрестности точки (2.7) в форме сходящегося ряда

$$(3.11) \quad \xi_1 = \xi_2 = 2 + 3(\rho - 2) + o(\rho - 2)$$

по целым положительным степеням $\rho - 2$.

Сравнивая (3.11) с (3.10) и (2.7) с (3.9), приходим к выводу, что в симметричной постановке задачи учет взаимодействия атомов — вторых соседей ведет к изменению определяемых параметров на величину порядка ϵ .

4. Обсуждение результатов. Из условий задачи нетрудно видеть, что речь в ней идет фактически о четырехатомной цепочке с фиксированными концевыми атомами 0 и 3, «вставленной» в жестко фиксируемый одномерный атомный массив. Такая постановка вызвана необходимостью учета взаимодействия несоседних атомов, и, вообще говоря, в п. 2 от нее можно было отказаться, что, однако, авторы не стали делать из соображений сохранения общности модели. Таким образом, полученные результаты можно сопоставить с имеющимися в [1].

Сравнение показывает, что снятие ограничения на симметрию, наложенного на цепочку в [1], приводит к появлению двух несимметричных форм потери устойчивости ее «идеальной» конфигурации, причем по достижении критического состояния (2.7) потеря устойчивости может происходить как по исследованной в [1] симметричной форме, так и по обнаруженным несимметричным, и имеет место совпадение соответствующих характеристик цепочки (длин связей, величины энергии) во всех формах вторичного равновесия. Следует, по-видимому, ожидать, что какие-либо несовершенства в строении цепочки (наличие атома замещения, например) нарушают такое «равноправие» форм. Авторы [1] рассматривали одно из таких несовершенств — ослабление средней связи цепочки, но применительно к расчету энергетических барьеров на пути продвижения трещины и только в предположении симметрии цепочки.

Учет взаимодействия несоседних атомов, характеризуемый изменением потенциальной энергии цепочки на величину порядка малого параметра ϵ , в симметричной постановке задачи не вносит коррективов в качественное поведение цепочки, количественные же изменения параметров имеют порядок ϵ . Однако в общей постановке даже такое малое изменение может иметь большое значение, например, при определении формы первой потери устойчивости «идеального» состояния цепочки.

Если модель Хирта в силу симметрии применима лишь к атомистически острым трещинам, то результаты исследования в п. 2 более общего случая растяжения цепочки могут быть использованы при моделировании распространения трещины, затупленной за счет сдвига и эмиссии дислокаций. Пусть атомы 0, 1, 2, 3 на рис. 1 образуют вершину затупленной трещины, тогда приложение силы, вызывающей критическое растяжение цепочки, имеет следствием разрыв одной из связей 0—1, 1—2, 2—3, что можно рассматривать как прорастание острой трещины из вершины затупленной.

Результаты работы имеют также отношение к вопросу о зарождении трещин. В [5] сформулирован подход к хрупким трещинам как нетривимальным формам равновесной деформации упругого твердого тела при приложении растягивающей нагрузки, проиллюстрированный на простом примере потери устойчивости среднего атома в трехатомной цепочке. Проведенное выше исследование равновесия четырехатомной цепочки с двумя свободными атомами подтверждает выдвинутую в [5] концепцию.

ЛИТЕРАТУРА

1. Markworth A. J., Hirth J. P. An atomistic model of crack extension by kink propagation // J. Mater. Sci.—1984.—V. 16, N 12.
2. Макмиллан Н. Идеальная прочность твердых тел // Атомистика разрушения: Сб. статей 1983—1985 гг./Сост. А. Ю. Ишлинский.— М.: Мир, 1987.

3. Girifalco L. A., Weizer V. G. Application of the Morse potential function to cubic metals // Phys. Rev.— 1959.— V. 114, N 3.
4. Вайнберг М. М., Треногин В. А. Теория ветвления решений нелинейных уравнений.— М.: Наука, 1969.
5. Новожиллов В. В. К основам теории равновесных трещин в упругих телах // ПММ.— 1969.— Т. 33, вып. 5.

г. Новосибирск

Поступила 20/XII 1991 г.,
в окончательном варианте —
29/V 1992 г.

УДК 53.672; 53 : 681.3

В. С. Сынах

МЕТОД РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

В последние 10—15 лет быстро развивается метод анализа газовых смесей, известный под названием газовой хроматографии (см., например, [1]). Метод состоит в том, что порцию анализируемой газовой смеси ионизируют и заставляют проходить некоторую разность потенциалов в нейтральном газе-наполнителе от катода или сетки A до коллектора B (рис. 1). Поскольку подвижности у различных ионов смеси разные, то они проходят путь L при этом за разное время. В результате происходит разделение смеси по сортам ионов, а на графике, например, зависимости силы тока через прибор от времени появляются характерные пики, по которым и обнаруживается присутствие ионов того или иного вещества. Метод отличается высокой чувствительностью и поэтому находит многочисленные приложения вплоть до криминалистики.

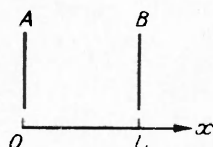


Рис. 1

Конструирование приборов для газовой хроматографии и анализ результатов измерений требуют численного решения соответствующей нестационарной задачи, включающей диффузию и другие процессы, происходящие в смеси различных ионов и нейтралов в электрическом поле. Однако все характерные времена для этих процессов много меньше времени распыливания хроматографических пиков. Это позволяет конструировать решение нестационарной задачи на основе решений стационарной задачи [2].

Схематически постановка решаемой далее стационарной задачи такова [3]. Поток электронов тепловой энергии направляется через сетку A к коллектору B . Пространство между ними заполнено инертным газом или азотом при атмосферном давлении p со слабой примесью исследуемого вещества — электрофора, молекулы которого ионизируются через прилипание к ним электронов. Конструкция прибора обычно такова, что поддерживается постоянным ток J отрицательных частиц от сетки к коллектору. Нужно по известной концентрации $N_e(0)$ электронов на сетке найти распределение $N_e(x)$ в интервале $0 < x < L$, что, в свою очередь, позволяет легко находить распределения концентрации ионов $N_i(x)$, поля $E(x)$, падение потенциала $U = \int E dx$ и т. д. На этой основе можно рассчитывать, например, вольт-амперные характеристики приборов или, решая обратную задачу, определять из экспериментов параметры, необходимые для интерпретации хроматографических измерений.

Условие постоянства тока может быть записано в виде

$$(1) \quad J = -D_e \frac{dN_e}{dx} - D_i \frac{dN_i}{dx} + v_e N_e + v_i N_i$$