

**ПОТЕРЯ УСТОЙЧИВОСТИ  
УЧАСТКА ЦЕПОЧКИ АТОМОВ  
ПРИ НАЛИЧИИ ПРИМЕСИ. СНИЖЕНИЕ ПРОЧНОСТИ  
ХРУПКИХ ТРЕЩИНОВАТЫХ ТЕЛ**

УДК 539.375

В. М. Корнев<sup>1</sup>, Ю. В. Тихомиров<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН,  
630090 Новосибирск

<sup>2</sup>Семипалатинский педагогический институт,  
490006 Семипалатинск

**1. Введение.** «Прикладная значимость механики разрушения определяется возможностью (в тех или иных реальных условиях) значительного понижения критических уровней усилий и энергии разрушения по сравнению с измеренными при стандартных испытаниях материалов. Такая возможность возникает под влиянием дефектов и поверхностно-активных сред» [1, с. 97]. К числу наиболее важных и распространенных дефектов структуры реальных кристаллических твердых тел относятся примеси [2, гл. 5, 8; 3]. «Существующие теории твердого тела не способны учесть или объяснить многие из факторов, которые известны металловедом как определяющие структуру и различные свойства твердых растворов. Такие факторы, как, например, химическое сродство или разница в размерах атомов, рассматриваются лишь полуэмпирически» [2, с. 489]. В атомистических моделях разрушения полуэмпирический учет влияния примеси ведется через главные факторы, определяющие поведение примесей в твердых растворах, — размерный и энергетический. Размерный фактор представляется в виде

$$\delta = (r_Q - r_M)/r_M, \quad (1.1)$$

где  $r_M$  и  $r_Q$  — кратчайшие межатомные расстояния в решетках растворителя  $M$  и растворенного элемента  $Q$  соответственно [2, с. 503]. При ненулевом значении  $\delta$  в атомном масштабе атомы растворителя и растворяемого элемента несколько смещаются из средних положений в кристаллической решетке и, таким образом, находятся в упругонапряженном состоянии постоянного статического смещения [2, с. 500; 4]. Так, ключевым параметром в машинных экспериментах [5, 6] выступала разница в размерах атомов кристаллита и тонкой пленки (из одного или нескольких атомных слоев), покрывающей поверхности трещины. Там же обнаружено, что если размеры атомов пленки меньше размера атомов кристаллита, то наблюдается хрупкое разрушение в целом пластичном кристаллите. Энергетический фактор не учитывался.

В данной работе на примере одномерной атомной модели показана возможность снижения прочности твердого тела, атомная решетка которого содержит примеси. Приведены конкретные примеры, имеющие физический смысл. В принципе уровень снижения прочности может достигать одного-двух порядков и определяется различиями в атомном взаимодействии. В условиях модели он может быть рассчитан по полученным формулам при наличии численных значений параметров известной потенциальной функции взаимодействия основных и примесных атомов, причем необходим учет как размерного, так и

энергетического фактора.

**2. Атомная модель хрупкого разрушения при наличии примеси.** Общая постановка задачи, сформулированная в [7], остается в целом неизменной: рассматриваемая трехатомная цепочка встроена в бесконечную цепочку зафиксированных атомов, но один атом этой цепочки считается атомом примеси (атомом замещения), соответственно меняется его взаимодействие с соседями, т. е. параметры потенциальной функции.

Рассматриваются трехатомные цепочки с примесным атомом, который является центральным или крайним. Определяются картины равновесия и соотношение  $t = P_*/p_*$  между критическими значениями силы  $P$ , растягивающей цепочку с примесью, и силы  $p$ , растягивающей «идеальную» цепочку. Это соотношение оказывается зависящим от разницы в параметрах атомного взаимодействия, причем учитываются как размерный, так и энергетический фактор. В качестве потенциала межатомного взаимодействия берется потенциал Морса

$$v(r) = D(\exp(-2\alpha(r - r_e)) - 2\exp(-\alpha(r - r_e))). \quad (2.1)$$

Поскольку в общем случае оказывается два набора параметров  $D$ ,  $\alpha$ ,  $r_e$  потенциала, то для упрощения анализа предполагается взаимодействие только между ближайшими соседями. Будем обозначать тип атома примеси буквой  $Q$ , тип остальных атомов — буквой  $M$ . Взаимодействие  $M$ - $Q$  описывается функцией Морса

$$v_{MQ}(r) = D_{MQ}(\exp(-2\alpha_{MQ}(r - r_e^{MQ})) - 2\exp(-\alpha_{MQ}(r - r_e^{MQ}))). \quad (2.2)$$

Для взаимодействия  $M$ - $M$  оставлены прежние безындексные обозначения (2.1). Введем в рассмотрение набор вещественных положительных безразмерных величин:

$$k = D_{MQ}/D. \quad (2.3)$$

$$\mu = \alpha_{MQ}/\alpha; \quad (2.4)$$

$$\varepsilon = \exp(\alpha(r_e^{MQ} - r_e)), \quad (2.5)$$

причем первые две величины отражают влияние энергетического фактора, а последняя — размерного, если положить, что он определяется разницей параметров  $r_e$  и  $r_e^{MQ}$  потенциалов (2.1) и (2.2) соответственно.

Возьмем произвольный атом цепочки, присвоив ему номер 0, а все прочие атомы занумеруем целыми числами (рис. 1). Будем считать, что при растяжении атомы с номерами  $\dots, -3, -2, -1, 1, 2, 3, \dots$  всегда занимают положения, отвечающие идеальной структуре растянутой цепочки, т. е.

$$\dots = r_{-3,-2} = r_{-2,-1} = 0,5r_{-1,1} = r_{1,2} = r_{2,3} = \dots \quad (2.6)$$

Пусть цепочка растянута силой  $P$  до состояния, в котором длины связей, фигурирующие в (2.6), равны некоторой величине  $d$ . Зафиксируем все атомы цепочки, кроме «нулевого», в занимаемых ими «идеальных» положениях. Тогда положение «нулевого» атома полностью определяется одной из величин  $r_{-1,0}$ ,  $r_{0,1}$ , т. е. расстояниями до его ближайших соседей (рис. 1). Выберем в качестве определяющей величину  $r_{-1,0}$ , тогда, поскольку  $r_{-1,1} = 2d$ , имеем

$$r_{0,1} = 2d - r_{-1,0}. \quad (2.7)$$

Поставим задачей описать поведение выбранного «нулевого» атома в зависимости от

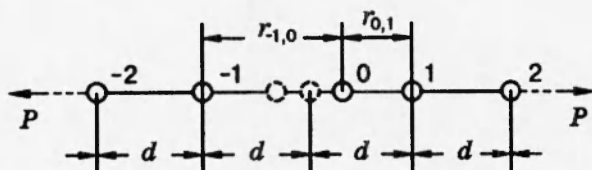


Рис. 1

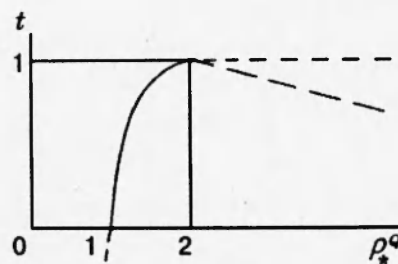


Рис. 2

степени растяжения цепочки и наличия примеси. Степень растяжения контролируется параметром  $d$ , который связан с деформацией  $\eta$  атомной связи ближайших соседей соотношением  $\eta = (d - d_0)/d_0$ . Рассмотрим случай взаимодействия только ближайших соседей, учет дальнего действия приведен в [7]. По условию соотношение (2.6) считается сохраняющим силу и при наличии примеси, т. е. все атомы цепочки, кроме одного свободного, жестко фиксируются в соответствии со значением  $P$  (значением  $d$ ), в том числе и в начальный момент, когда  $P = 0$ , в связи с чем при ненулевом размерном факторе  $\delta$  рассматриваемая трехатомная часть цепочки будет находиться при  $P = 0$  в напряженном состоянии сжатия или растяжения, а ее атомные связи испытывать соответствующую деформацию. Это согласуется с упомянутым выше влиянием размерного фактора. Однако релаксация атомов не учитывается; для ее учета нужно изменить надлежащим образом длину трехатомной цепочки в сравнении с  $d$ .

Введем безразмерные переменные

$$\xi = \exp(\alpha(r_{-1,0} - r_e)), \quad \rho = \exp(\alpha(d - r_e)). \quad (2.8)$$

Заметим, что  $\xi$  и  $\rho$  всегда положительны, более того, поскольку мы рассматриваем растяжение, то  $r_{-1,0} \geq r_e$ ,  $d \geq r_e$ , поэтому  $\xi \geq 1$ ,  $\rho \geq 1$ . Формулы (2.8) устанавливают взаимно однозначное соответствие между наборами величин  $\xi$ ,  $\rho$  и  $r_{-1,0}$ ,  $d$ , и можно решать задачу в переменных  $\xi$ ,  $\rho$ . При этом  $\rho$  определяет растяжение цепочки, а  $\xi$  — положение атома 0.

Расчет в [7] силы  $p$ , растягивающей «идеальную» бесконечную цепочку, велся по формуле  $p = p(\rho) = (2D\alpha/\rho^2)(\rho - 1)$ , а критической силы  $p_*$  (при  $\rho = \rho_* = 2$ ) — по формуле  $p_* = p(\rho_*) = D\alpha/2$ , т. е.  $p_*$  равно  $p_m$  — теоретической прочности на разрыв атомной связи.

Условия модели и вывод этой формулы через предельный переход позволяют воспользоваться ею и в случае цепочки с примесью. Тогда

$$t = P_*/p_* = 4(\rho_*^Q)^{-2}(\rho_*^Q - 1), \quad (2.9)$$

где  $P_* = p(\rho_*^Q)$ ;  $\rho_*^Q$  — критический параметр растяжения цепочки с примесью.

**З а м е ч а н и е.** Дискретный критерий хрупкой прочности Новожилова [8, 9] непосредственно связан с использованием оценок теоретической прочности атомной структуры в вершине трещины. Теоретическая прочность при наличии примеси может резко уменьшаться.

График зависимости  $t(\rho_*^Q)$  приведен на рис. 2. Случай  $\rho_*^Q < 1$  не представляет интереса, так как тогда  $t < 0$ ,  $P_* < 0$ , что означает разрыв цепочки до приложения какой бы то ни было растягивающей силы. В свою очередь, неравенство  $\rho_*^Q > 2$  означает, что обе связи свободного атома оказываются «прочнее» связей атомов стесненной части цепоч-

Таблица 1

<i>M</i>	<i>Q</i>	$\alpha$	$\alpha_{MQ}$	<i>D</i>	$D_{MQ}$	$r_e$	$r_e^{MQ}$
Cu	Gd	1,355	0,775	0,338	0,310	2,871	4,058
Gd	Cu	0,763	0,775	0,302	0,310	4,469	4,058
Al	Gd	1,052	0,810	0,274	0,339	3,400	4,097
Gd	Al	0,763	0,810	0,302	0,339	4,469	4,097
Fe	Al	1,358	0,972	0,418	0,373	2,871	3,378
Al	Fe	1,052	0,972	0,274	0,373	3,400	3,378
Cu	Au	1,283	1,315	0,579	0,623	2,811	2,937
Au	Cu	1,403	1,315	0,725	0,623	3,048	2,937
Ni	Fe	1,366	1,419	0,754	0,645	2,720	2,755
Fe	Ni	1,893	1,419	0,727	0,645	2,820	2,755

ки, для которых  $\rho_* = 2$ ; этот случай исключается постановкой задачи. Реальный смысл несет в себе только часть графика, изображенная сплошной линией и соответствующая отрезку  $1 \leq \rho_*^Q \leq 2$ ; именно этот случай представляет интерес с точки зрения понижения критических усилий, и только он рассматривается в дальнейшем.

Отметим, что прочность цепочки на разрыв может понизиться весьма существенно: так,  $t < 0,2$ , если  $1 \leq \rho_*^Q < 1,056$ ,  $t < 0,1$ , если  $1 \leq \rho_*^Q < 1,026$ , и даже  $t < 0,01$ , если  $1 \leq \rho_*^Q < 1,0025$ . Будучи расположенной в вершине хрупкой трещины, такая цепочка способна привести к распространению трещины при нагрузках, на 1–2 порядка меньших теоретической прочности материала. Как будет показано,  $\rho_*^Q$ , а следовательно, и  $t$  определяются через соотношения (2.3)–(2.5) между параметрами потенциальных функций. Количество данных по значениям параметров потенциальной функции Морса взаимодействия атомов в двухкомпонентных системах весьма ограничено. В табл. 1 приведены значения параметров потенциальных функций Морса, рассчитанные в [4] для сплавов  $\text{Cu}_3\text{Au}$ ,  $\text{Ni}_3\text{Fe}$  и в [10] для сплавов  $\text{GdAl}$ ,  $\text{GdCu}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Al}$ , т. е. для 10 пар  $M-Q$ . По этим данным проводились расчеты в каждом рассматриваемом модельном случае.

**3. Растяжение цепочки со свободным атомом примеси.** Рассмотрим задачу об устойчивости цепочки атомов при растяжении, когда примесным типа  $Q$  является свободный в перемещениях атом 0 цепочки, несимметричное равновесное положение этого атома отмечено либо штриховкой, либо закрашиванием на рис. 3. Имеем, таким образом, трехатомную цепочку  $(-1)-0-1$  из двух связей  $M-Q$ , вставленную в «середицу» бесконечной цепочки из связей  $M-M$ . Определим приходящуюся на «нулевой» атом часть  $V_0$  полной потенциальной энергии взаимодействия атомов цепочки:

$$V_0 \equiv V_0(r_{-1,0}, d) = v_{MQ}(r_{-1,0}) + v_{MQ}(2d - r_{-1,0}). \quad (3.1)$$

Если ввести безразмерные переменные  $\zeta$  и  $\lambda$  (см. (2.8)):

$$\zeta = \exp(\alpha_{MQ}(r_{-1,0} - r_e^{MQ})), \quad \lambda = \exp(\alpha_{MQ}(d - r_e^{MQ})), \quad (3.2)$$

то решение из [7] при  $\varepsilon \equiv 0$  полностью переносится на настоящий случай с заменой  $D$  на  $D_{MQ}$ ,  $x$  на  $\zeta$ ,  $y$  на  $\lambda$  и результаты его аналогичны приведенным в [7]. При росте  $\lambda$  от начального значения  $\lambda_0$  (см. формулу (3.4)), соответствующего отсутствию внешнего воздействия на цепочку  $P = 0$ , атом примеси 0 находится в устойчивом равновесном положении, симметричном относительно ближайших соседей  $-1$  и  $1$ . Так происходит вплоть до

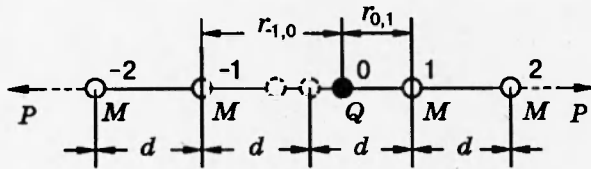


Рис. 3

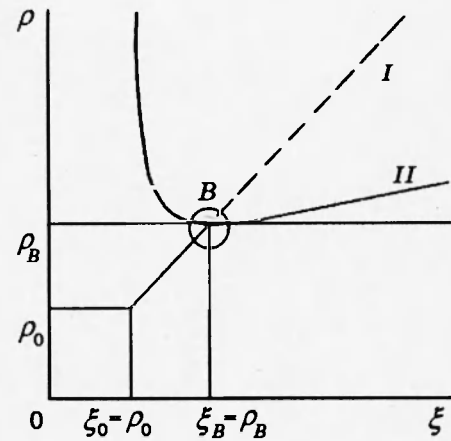


Рис. 4

$\lambda = \lambda_B = 2$  включительно, значение  $\lambda_B$  соответствует точке ветвления  $B(\lambda_B, \lambda_B)$  основной траектории равновесия  $\{\zeta = \lambda\}$  атома 0 в пространстве  $O\zeta\lambda$ . С превышением критического значения  $\lambda_B = 2$  атом примеси 0 переходит в одно из двух устойчивых несимметричных относительно соседей положений, характеризуемых соотношением  $\zeta^2 - \lambda^2\zeta + \lambda^2 = 0$ . Можно показать, что эти вторичные положения атома примеси взаимно симметричны относительно центра симметрии трехатомной цепочки  $(-1)-0-1$  и одна из связей  $(-1)-0, 0-1$  имеет длину сверх критической для взаимодействия  $M-Q$ , что идентично ее разрыву. Картина равновесных состояний цепочки в пространстве  $O\xi\rho$  повторяет такую же для «идеального» случая [7] и приведена на рис. 4, где кривые *I* и *II* описывают соответственно основную и вторичную траектории равновесия, *B* — точка ветвления. При взаимодействии только между ближайшими соседями критическое значение  $\lambda_* = \lambda_B = 2$  и сила  $P_* = P(\lambda_*) = P_B$ . Чтобы найти  $P_*$  и  $t$  (2.9), выразим переменную  $\rho$  из (2.8) через переменную  $\lambda$ . Имеем  $\lambda = \exp(\alpha_{MQ}(d - r_e^{MQ})) = (\exp(\alpha(d - r_e)) \exp(-\alpha(r_e^{MQ} - r_e)))^\mu = (\rho/\varkappa)^\mu$ , т. е.

$$\rho = \varkappa\lambda^{1/\mu}, \quad (3.3)$$

где  $\mu$  и  $\varkappa$  определены в (2.4), (2.5). Поскольку начальное значение  $\rho = \rho_0 = 1$ , то

$$\lambda_0 = (\rho_0/\varkappa)^\mu = \varkappa^{-\mu} = \exp(\alpha_{MQ}(r_e - r_e^{MQ})), \quad (3.4)$$

т. е. начальная длина связей  $d_0 = r_e$ .

Если выразить через  $\zeta$  переменную  $\xi$  из (2.8), можно построить диаграмму равновесных состояний цепочки в пространстве  $O\xi\rho$  и сравнить ее с диаграммой для «идеального» случая. Из рис. 5 видно (кривая *1* — «идеальная» цепочка, *2* — цепочка со свободным атомом примеси *Q*), что с введением примеси картина не изменяется качественно, но ветвление основной траектории равновесия *I* происходит в точке  $B_Q$ , когда в силу (3.3)

$$\rho_*^Q = \varkappa\lambda_*^{1/\mu} = 2^{1/\mu}\varkappa. \quad (3.5)$$

Подставив (3.5) в формулу (2.9), получим зависимость  $t$  от двух величин:  $\mu$  и  $\varkappa$ . Первое означает, что на возможность снижения уровня критических усилий оказывает влияние форма графика потенциальной функции, определяемая величиной  $\alpha$ ; эта возможность тем больше, чем круче стенки потенциальной «ямы» примесной связи  $M-Q$  (функция (2.2)).

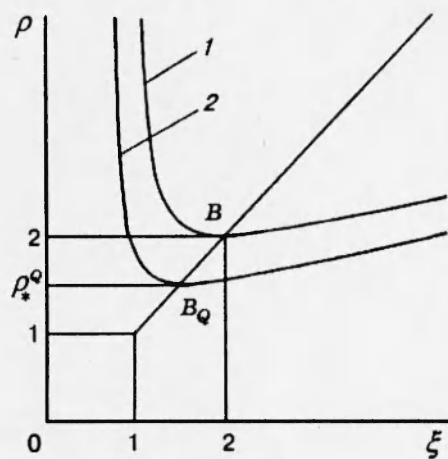


Рис. 5

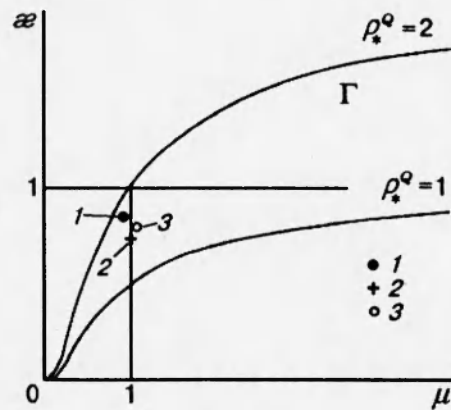


Рис. 6

Таблица 2

$M$	$Q$	$\rho_*^Q$	$t$
Au	Cu	1,793	0,987
Gd	Cu	1,445	0,8528
Gd	Al	1,446	0,8535

Второе представляет собой влияние размерного фактора (1.1): чем меньше равновесная длина  $r_e^{MQ}$  связи  $M-Q$  в сравнении с  $r_e$ , тем сильнее эта связь деформирована в цепочке и тем меньшее усилие требуется приложить для ее разрыва. Снижение  $P_*$  и  $t$  происходит, если совокупное действие указанных факторов приводит к уменьшению критической длины связи  $M-Q$

$$r_m^{MQ} = r_e^{MQ} + \alpha_{M(Q)}^{-1} \ln 2 \quad (3.6)$$

по сравнению с  $r_m$ . Отметим, что величина  $k$  в формуле (3.5) не фигурирует, и, следовательно, соотношение глубин потенциальных «ям» графиков  $v_{MQ}$  и  $v$  не играет роли. Тем самым в рассматриваемом случае влияние энергетического фактора в целом на разрыв цепочки ограничено.

Два предельных случая могут иметь место, когда  $\rho_*^Q = 2$  и  $t = 1$  и когда  $\rho_*^Q = 1$  и  $t = 0$ . В первом из них  $\alpha = 2^{1-1/\mu}$ , во втором  $\alpha = 2^{-1/\mu}$ ; графически эти зависимости представлены на рис. 6. Нетрудно видеть, что значениям  $0 < t < 1$ , т. е. снижению прочности на разрыв трехатомной цепочки с примесным средним атомом, отвечают точки  $(\mu, \alpha)$  из области  $\Gamma$ , причем чем ближе точка  $(\mu, \alpha) \in \Gamma$  к кривой  $\alpha = 2^{-1/\mu}$ , тем меньше значение  $t$ . На рис. 6 1 — точка области, которая соответствует примеси Cu в Au, 2 — примеси Cu в Gd, 3 — примеси Al в Gd. Расчеты по данным табл. 1 показывают, что снижение критического усилия имеет место для трех пар  $M-Q$ , результаты расчетов приведены в табл. 2.

4. Растяжение трехатомной цепочки с крайним атомом примеси. Пусть теперь атом примеси является одним из двух ближайших соседей свободного атома цепочки, располагаясь, например, на месте с номером 1 (на рис. 7 он затемнен). Таким образом,

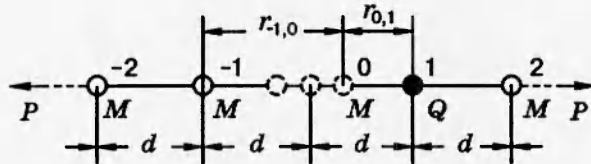


Рис. 7

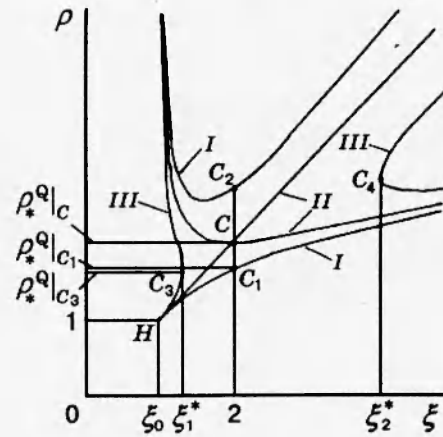


Рис. 8

трехатомная часть (-1)-0-1 цепочки имеет вид M-M-Q, и энергия «нулевого» атома

$$V_0 \equiv V_0(r_{-1,0}; d) = v(r_{-1,0}) + v_{MQ}(2d - r_{-1,0}). \tag{4.1}$$

Если перейти к переменным  $\xi, \rho$  по формулам (2.8), то  $V_0 \equiv V_0(\xi, \rho)$  и

$$\left(\frac{2}{D}\right)V_0 = \frac{1}{\xi^2} - \frac{2}{\xi} + k \left(\frac{\xi^2 \varkappa^2}{\rho^4}\right)^\mu - 2k \left(\frac{\xi \varkappa}{\rho^2}\right)^\mu. \tag{4.2}$$

Тогда уравнение равновесия «нулевого» атома  $\partial V_0 / \partial \xi = 0$  равносильно следующему:

$$(\xi - 1)\rho^{4\mu} - k\mu\varkappa^\mu \xi^{\mu+2} \rho^{2\mu} + k\mu\varkappa^{2\mu} \xi^{2\mu+2} = 0 \tag{4.3}$$

(параметры  $k, \mu, \varkappa$  считаются фиксированными).

Нахождение решений уравнения равновесия (4.2) и их исследование аналитическими методами представляют собой задачу, существенно более сложную, чем для «идеальной» цепочки. Так, в общем случае записать решения уравнения (4.3) в виде  $\xi = \xi(\rho)$  не представляется возможным. Разрешим это уравнение относительно  $\rho$ :

$$\rho_{(1),(2)} = \left(\frac{k\mu\varkappa^\mu \xi^{\mu+2}}{2(\xi - 1)} \left(1 \mp \left(1 - \frac{4(\xi - 1)}{k\mu\xi^2}\right)^{1/2}\right)^{1/2\mu}\right)^{1/2\mu}. \tag{4.4}$$

Здесь знак + относится к  $\rho_{(2)}$ . Вещественные решения (4.4) обладают тем свойством, что

$$\rho_{(1)}(\xi) \leq \rho_{(2)}(\xi) \tag{4.5}$$

при заданном  $\xi$ , и существуют при условии  $k\mu\xi^2 - 4\xi + 4 \geq 0$ . Введем обозначение

$$\varphi = k\mu. \tag{4.6}$$

Очевидно, величина  $\varphi$  положительна (см. соотношения (2.3) и (2.4), отражающие влияние энергетического фактора). Перепишем последнее неравенство:

$$\varphi\xi^2 - 4\xi + 4 \geq 0. \tag{4.7}$$

Его решение зависит от  $\varphi$ . Если  $\varphi > 1$ , то неравенство (4.7) является строгим и выполняется для всех  $\xi$ , так что неравенство (4.5) также будет строгим.

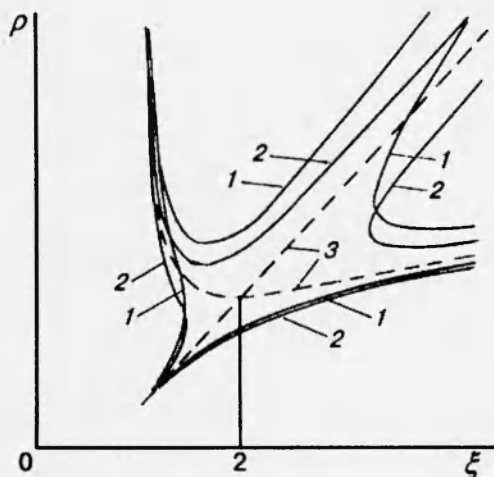


Рис. 9

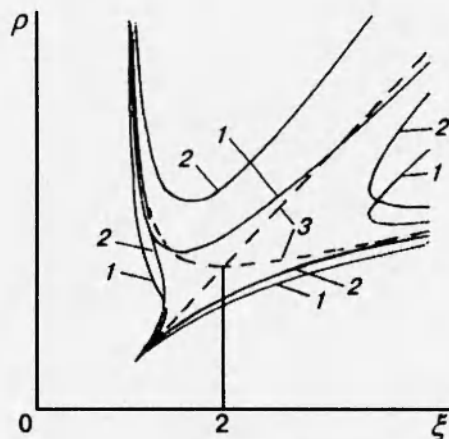


Рис. 10

Чтобы рассмотреть случай  $0 < \varphi \leq 1$ , решим предварительно уравнение

$$\varphi \xi^2 - 4\xi + 4 = 0. \tag{4.8}$$

Оно разрешимо в вещественных числах при  $\varphi \leq 1$ , его корни суть

$$\xi_{1,2}^* = \frac{2}{\varphi} (1 \mp \sqrt{1 - \varphi}), \tag{4.9}$$

где знак  $+$  относится к  $\xi_1^*$ . При  $\varphi = 1$  корни совпадают:  $\xi_1^* = \xi_2^* = 2$ . Получаем, что при  $0 < \varphi \leq 1$  условие (4.7) будет выполнено и решения (4.4) существуют, если  $\xi \leq \xi_1^*$  либо  $\xi \geq \xi_2^*$ , причем  $\rho_{(1)}(\xi) = \rho_{(2)}(\xi)$  тогда и только тогда, когда  $\xi = \xi_{1,2}^*$ .

Соотношения (4.4) устанавливают связь параметра растяжения цепочки  $\rho$  с параметром конфигурации  $\xi$  в равновесных состояниях цепочки. Графически они изображаются кривыми в плоскости  $O\xi\rho$ , каждая точка которых соответствует определенному состоянию равновесия. На рис. 8 при  $\varkappa = \text{const}$  показано характерное расположение этих кривых для  $\varphi > 1$ ,  $\varphi = 1$ ,  $\varphi < 1$  при одном и том же значении  $\varkappa$  (кривые I-III).

Как влияет на вид кривых (4.4) изменение значений параметров  $k$ ,  $\mu$ ,  $\varkappa$ , можно проследить по рис. 9-11, на которых линии 3 — траектории равновесия в «идеальном» случае, когда  $k = \mu = \varkappa = 1$ . На рис. 9 кривые 1, 2 отвечают  $k = 1,1; 0,9$  при  $\varkappa = 1$ ,  $\varphi = 0,855$  и  $1,125$ . На рис. 10 кривые 1, 2 соответствуют  $\mu = 1,25; 0,9$  при  $\varkappa = 1$ ,  $\varphi = 0,81$  и  $1,2$ . На рис. 11 кривые 1, 2 отвечают  $\varkappa = 0,75; 1,25$  при  $\mu = 1$ ,  $\varphi = 0,8$  и  $1,2$ .

Поскольку решения (4.4) имеют вид  $\rho = \rho(\xi)$ , нет возможности исследовать все поведение цепочки при растяжении: по  $\rho$  находить  $\xi$ . В связи с этим ограничимся рассмотрением некоторых характерных состояний равновесия цепочки и попытаемся качественно описать происходящие с ней при растяжении изменения.

Обратимся прежде всего к начальному равновесному состоянию цепочки (точка  $H$  на рис. 8), когда  $P = 0$ ,  $\rho = \rho_0 = 1$  и  $d = d_0 = r_e$ . Подставляя  $\rho = 1$  в уравнение (4.3) и учитывая (4.6), получим уравнение для определения соответствующего значения  $\xi_0$ :

$$\varphi \varkappa^{2\mu} \xi_0^{2\mu+2} - \varphi \varkappa^\mu \xi_0^{\mu+2} + \xi_0 - 1 = 0. \tag{4.10}$$

Перепишем уравнение (4.10) в виде  $\varphi \varkappa^\mu \xi_0^{\mu+2} (\varkappa^\mu \xi_0^\mu - 1) + (\xi_0 - 1) = 0$  и предположим, что



$\varepsilon < 1$ . Тогда, очевидно,  $\xi_0 > 1$ , так как в противном случае левая часть равенства была бы отрицательной. Поэтому заведомо имеем  $\varepsilon^\mu \xi_0^\mu - 1 < 0$ , т. е.  $\xi_0 < 1/\varepsilon$ . Итак,

$$1 < \xi_0 < 1/\varepsilon \quad \text{при} \quad \varepsilon < 1. \quad (4.11)$$

Точно так же показывается, что

$$1/\varepsilon < \xi_0 < 1 \quad \text{при} \quad \varepsilon > 1; \quad (4.12)$$

$$\xi_0 = 1 \quad \text{при} \quad \varepsilon = 1. \quad (4.13)$$

Таким образом, при ненулевом размерном факторе ( $\varepsilon \neq 1$ ) связи  $(-1)-0$  и  $0-1$  оказываются деформированными уже в начальном состоянии; при заданных  $k$ ,  $\mu$ ,  $\varepsilon$  длины этих связей определяются через  $\xi_0$ . В частности, обе связи растянуты при  $\varepsilon < 1$ .

Найдем теперь значения  $\xi$  и  $\rho$  в критических состояниях каждой из связей  $(-1)-0$  и  $0-1$ .

В силу (3.6) критическая длина примесной связи  $0-1$

$$r_{0,1}^* = r_e^{MQ} + \frac{\ln 2}{\alpha_{MQ}}. \quad (4.14)$$

Если теперь обозначить (ср. (3.2))

$$\zeta = \exp(\alpha_{MQ}(r_{0,1} - r_e^{MQ})), \quad (4.15)$$

то  $r_{0,1}^*$  соответствует  $\zeta_* = 2$ . Используя (2.4), (2.7), (2.8), определим связь параметров  $\rho$ ,  $\xi$  и  $\zeta$ :

$$\rho^2 = \zeta^{1/\mu} \varepsilon \xi. \quad (4.16)$$

Подставив в эту формулу  $\zeta_* = 2$ , находим

$$\rho_*^Q = (2^{1/\mu} \varepsilon \xi^*)^{1/2}. \quad (4.17)$$

Здесь  $\xi^*$  отвечает  $\zeta_* = 2$  в состоянии равновесия цепочки. Чтобы отыскать  $\xi^*$ , подставим (4.17) в уравнение (4.3), исключая  $\rho$ . После упрощений получим, что  $\varphi(\xi^*)^2 - 4\xi^* + 4 = 0$ . Это означает, что  $\xi^*$  есть корень рассмотренного выше уравнения (4.8), который существует только при  $\varphi \leq 1$  (см. (4.9)).

Таким образом, равновесных состояний цепочки с критической длиной (4.14) примесной связи  $0-1$  существует не более двух, если только  $0 < \varphi \leq 1$ . Значения  $\rho_*^Q$  находятся подстановкой (4.9) в формулу (4.17).

Возможны два случая.

1. Если  $\varphi = 1$ , то  $\xi_1^* = \xi_2^* = 2$  и рассматриваемые критические состояния совпадают (точка  $C$  пересечения кривых  $II$  на рис. 8). Состояние  $C$  цепочки характерно тем, что в нем связь  $(-1)-0$  также растянута до критической длины

$$r_{-1,0}^* = r_e + \alpha^{-1} \ln 2. \quad (4.18)$$

В точке  $C$

$$\rho_*^Q|_C = (2^{1+1/\mu} \varepsilon)^{1/2}. \quad (4.19)$$

Легко видеть, что этот случай сходен с рассмотренным в п. 3. Критическое усилие  $P_*$  для цепочки с примесью оказывается меньше, чем для «идеальной» цепочки, если  $1 \leq \rho_*^Q < 2$ . Это неравенство вместе с (4.19) позволяет определить множество пар значений параметров

( $\mu, \varkappa$ ), при которых прочность цепочки на разрыв снижается вследствие примеси. Этому множеству отвечают точки области  $\Gamma$  на рис. 12 ( $\varphi = 1$ ).

2. Если  $0 < \varphi < 1$ , то нетрудно показать, что

$$1 < \xi_1^* < 2 < \xi_2^*. \quad (4.20)$$

В самом деле, предположим противное, т. е. что, например,  $\xi^* > 2$ . Тогда  $1 - \varphi \geq \sqrt{1 - \varphi}$ , что при  $0 < \varphi < 1$  невозможно. Аналогично (от противного) доказываются остальные части неравенства. Таким образом, при  $0 < \varphi < 1$  существует два различных равновесных состояния цепочки, в которых примесная связь 0-1 растянута на критическую длину (4.14), на рис. 8 они обозначены  $C_3$  и  $C_4$ . Точки  $C_3$  и  $C_4$  — это точки «склейки» ветвей кривых (4.4), потому что при  $\xi = \xi_{1,2}^*$  неравенство (4.5) обращается в равенство. Значения  $\rho_*^Q$  в этих точках находятся подстановкой (4.9) в (4.17). Заметим, что вследствие (4.20)  $\rho_*^Q(\xi_1^*) < \rho_*^Q(\xi_2^*)$ , так что при квазистатическом растяжении цепочки с постепенным увеличением силы  $P$  и длины  $d$  состояние  $C_3$  достигается первым при  $\rho = \rho_*^Q(\xi_1^*)$ ; характеризующая цепочку точка движется при этом от начального состояния  $H$  до  $C_3$  по «левой» из траекторий равновесия  $III$  на рис. 8. Вследствие сложности соотношений (4.2)–(4.4) проследить за изменениями в конфигурации цепочки при переходе через точку  $C_3$  можно лишь качественно. График показывает (с учетом условия (4.7) и неравенства (4.20)), что в точке  $C_3$  величина  $\xi$  достигает наибольшего на «левой» ветви значения ( $\xi_1^* < 2$ ), так что наибольшая длина  $r_{-1,0}$  связи (-1)-0 оказывается меньше критической (4.18). Дальнейшее квазистатическое растяжение ( $\rho > \rho_*^Q(\xi_1^*)$ ) приводит к уменьшению  $\xi$  и увеличению  $\zeta$ .

В самом деле, поскольку  $\xi$  — ограниченная величина, в силу (4.16) параметр  $\zeta \rightarrow \infty$  при  $\rho \rightarrow \infty$ . Это означает, что  $r_{-1,0} \rightarrow \infty$ , т. е. разрыв примесной связи 0-1. Чтобы доказать уменьшение  $\xi$ , выразим  $\xi$  через  $\rho$  и  $\zeta$  с помощью формулы (4.16) в виде

$$\xi = \zeta^{-1/\mu} \varkappa \rho^2 \quad (4.21)$$

и подставим найденное в уравнение (4.3). В результате получим представление  $\rho^2$  через  $\zeta$ :

$$\rho^2 = \frac{\zeta^{2+1/\mu} \varkappa}{2\varphi(\zeta - 1)} \left( 1 \mp \left( 1 - \frac{4\varphi(\zeta - 1)}{\zeta^2} \right)^{1/2} \right). \quad (4.22)$$

Формулы (4.21) и (4.22) позволяют найти связь  $\xi$  и  $\zeta$  в точках траекторий равновесия при  $0 < \varphi < 1$ , т. е. вдоль кривых  $III$  на рис. 8. В частности, в точках верхней части «левой» траектории (т. е. при  $\rho > \rho_*^Q(\xi_1^*)$ )

$$\xi = \frac{\zeta^2}{2\varphi(\zeta - 1)} \left( 1 - \left( 1 - \frac{4\varphi(\zeta - 1)}{\zeta^2} \right)^{1/2} \right).$$

Переходя в последнем равенстве к пределу при  $\zeta \rightarrow \infty$ , получим  $\xi \rightarrow 1 + 0$ . Следовательно, длина  $r_{-1,0} \rightarrow r_e$ .

При  $\varphi > 1$ , как было отмечено выше, равновесных состояний цепочки с критической длиной связи 0-1 просто не существует. Для выяснения поведения цепочки в этом случае рассмотрим, что происходит при растяжении со связью (-1)-0. Ее критическая длина определяется формулой (4.18) и достигается при  $\xi = \xi_{\pm} = 2$ . Сопоставление этого значения  $\xi$  с условием (4.7) показывает, что равновесные состояния цепочки с критической длиной связи (-1)-0 возможны, если только  $\varphi \geq 1$ .

Предположим, что  $\varphi > 1$  (случай  $\varphi = 1$  уже был рассмотрен выше (точка  $C$  на рис. 8)). Пусть  $\zeta^*$  — значение параметра  $\zeta$ , соответствующее  $\xi_{\pm} = 2$  в состоянии равновесия. Из

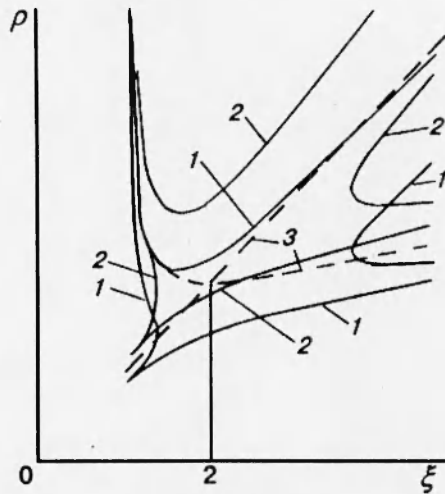


Рис. 11

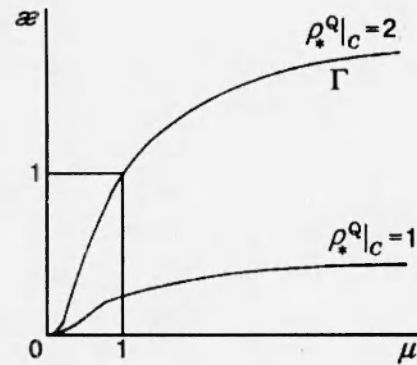


Рис. 12

связи  $\rho$ ,  $\xi$  и  $\zeta$  (см. (4.16)) при  $\xi = \xi_* = 2$  следует

$$\rho_*^Q = (2\alpha(\zeta^*)^{1/\mu})^{1/2}. \quad (4.23)$$

Подставляя (4.23) и  $\xi = 2$  в уравнение (4.3), имеем

$$(\zeta^*)^2 - 4\varphi\zeta^* + 4\varphi = 0, \quad (4.24)$$

откуда находим два значения  $\zeta^*$ :

$$\zeta_{1,2}^* = 2\varphi \left( 1 \mp \sqrt{1 - \frac{1}{\varphi}} \right), \quad (4.25)$$

существующие в вещественных числах, очевидно, только при  $\varphi \geq 1$ . Знак  $+$  соответствует  $\zeta_2^*$ . Таким образом, получено другое доказательство того, что при  $\varphi < 1$  равновесных состояний цепочки с критической длиной связи  $(-1)-0$  не существует.

Обратимся к иным следствиям формулы (4.25). С помощью тех же рассуждений, что использовались при доказательстве неравенства (4.20), можно показать, что

$$1 < \zeta_1^* < 2 < \zeta_2^*, \quad (4.26)$$

т. е. при  $\varphi > 1$  существует два различных равновесных состояния цепочки, в которых связь  $(-1)-0$  растянута на критическую длину (4.18). На рис. 8 они обозначены соответственно  $C_1$  и  $C_2$ . Значения  $\rho_*^Q$  в этих точках определяются подстановкой (4.25) в (4.26), причем  $\rho_*^Q(\zeta_1^*) < \rho_*^Q(\zeta_2^*)$  в силу (4.26), так что при квазистатическом растяжении цепочки состояние  $C_1$  будет достигнуто первым при  $\rho = \rho_*^Q(\zeta_1^*)$ . Это видно из рис. 8: характеризующая цепочку точка движется от начальной точки  $H$  до  $C_1$  вдоль «нижней» из двух траекторий равновесия  $I$ , определяемой  $\rho_{(1)}(\xi)$  в (4.4).

Для исследования закритического поведения цепочки найдем представление  $\zeta$  через  $\xi$  в точках «нижней» траектории, исключив  $\rho$  из (4.16) с помощью (4.4). Получим аналогичное (4.23) выражение

$$\zeta = \frac{\varphi\xi^2}{2(\xi-1)} \left( 1 - \left( 1 - \frac{4(\xi-1)}{\varphi\xi^2} \right)^{1/2} \right). \quad (4.27)$$

Нетрудно показать, что при  $\varphi > 1$  значение  $\zeta$  в (4.27) всегда превышает единицу. Если исследовать функцию (4.27) на монотонность и экстремум, выясняется, что  $\zeta(\xi)$  с увеличением  $\xi$  возрастает до наибольшего на «нижней» траектории значения  $\zeta_1^* < 2$  в критической точке  $C_1$ , а в последующем убывает, так что  $\zeta \rightarrow 1 + 0$ , когда  $\xi \rightarrow \infty$ . Значит, во всем диапазоне изменения  $\xi$  вдоль «нижней» траектории величина  $\zeta$  ограничена. Из соотношения (4.16) заключаем, что  $\rho$  и  $\xi$  одновременно стремятся к бесконечности. Таким образом, при  $\varphi > 1$  разрыв претерпевает связь  $(-1)-0$ , ее длина  $r_{-1,0} \rightarrow \infty$  при  $\rho \rightarrow \infty$ , в то время как примесная связь  $0-1$ , не достигнув критической длины (4.14), начинает сокращаться, так что  $r_{0,1} \rightarrow r_e^{MQ}$  при  $\rho \rightarrow \infty$ .

Заметим, что все приведенные рассуждения относительно поведения цепочки справедливы в предположении, что не существует возможности преодоления энергетического барьера, разделяющего устойчивые равновесные состояния цепочки. Устойчивость равновесия цепочки вдоль «левой» из траекторий равновесия III и «нижней» из траекторий I доказывается исследованием знаков второй производной  $\partial^2 V_0 / \partial \xi^2$  вдоль этих ветвей.

Перейдем к вопросу снижения прочности цепочки на разрыв под влиянием примеси. Критическая величина  $\rho_*^Q$  определяется значениями безразмерных положительных параметров  $\varphi$ ,  $\mu$ ,  $\varkappa$  при  $0 < \varphi < 1$  из формул (4.17), (4.9):

$$\rho_*^Q = \rho|_{C_1} = \left( 2^{1+1/\mu} \varkappa \frac{1}{\varphi} (1 - \sqrt{1 - \varphi}) \right)^{1/2}; \quad (4.28)$$

при  $\varphi > 1$  из формул (4.23), (4.25):

$$\rho_*^Q = \rho|_{C_3} = \left( 2^{1+1/\mu} \varkappa \left( \varphi \left( 1 - \sqrt{\frac{1}{\varphi}} \right) \right)^{1/\mu} \right)^{1/2}; \quad (4.29)$$

при  $\varphi = 1$  из формулы (4.19), этот случай можно присоединить к одному из предыдущих.

Объясним физический смысл параметра  $\varphi$ :

$$\varphi = k\mu = \frac{D_{MQ} \alpha_{MQ}}{D\alpha} - \frac{p_m^{MQ}}{p_m},$$

т. е.  $\varphi$  есть мера соотношения теоретических прочностей на разрыв атомных связей  $M-Q$  и  $M-M$ . Таким образом, место разрыва цепочки в рассматриваемой модели определяется исключительно энергетическим фактором — соотношением прочностей связей: разрывается менее прочная связь (очевидный на первый взгляд результат), однако любопытным является отсутствие влияния размерного фактора. По-видимому, это связано с условиями стеснения атомов в модели («трехатомная цепочка с одним свободным атомом»). Воздействие обоих факторов (размерного и энергетического) на прочность цепочки проявляется количественно через величину  $\rho_*^Q$ . Как установлено в п. 2, прочность цепочки понижается при наличии примеси, если  $1 \leq \rho_*^Q < 2$ , где  $\rho_*^Q$  вычисляется по формуле (4.28) или (4.29) в зависимости от  $\varphi$ . Расчеты по данным табл. 1 показали, что из десяти пар  $M-Q$  в семи случаях прочность  $P_*$  цепочки из атомов типа  $M$  с примесью  $Q$  меньше прочности  $p_*$  «идеальной» цепочки из атомов типа  $M$ , причем для трех пар из этих семи уменьшение прочности наблюдалось и в задаче п. 3.

Результаты расчетов приведены в табл. 3. При их изучении обращает на себя внимание отсутствие зависимости результата от каждой из величин  $k$ ,  $\mu$ ,  $\varkappa$ ,  $\varphi$  (а также  $\xi_0$ ,  $r_m$ ,  $r_m^{MQ}$ ), взятой по отдельности. Так, в двух из упомянутых семи случаев  $\varkappa$  больше единицы, в пяти меньше, в четырех случаях  $\varphi$  превышает единицу, а в трех остальных меньше

Таблица 3

<i>M</i>	<i>Q</i>	<i>k</i>	$\mu$	$\alpha$	$\varphi$	$\rho_*^Q$	<i>t</i>
Gd	Cu	1,027	1,016	0,731	1,044	1,551	0,916
Gd	Al	1,124	1,062	0,753	1,193	1,450	0,856
Al	Fe	1,361	0,924	0,977	1,258	1,661	0,958
Cu	Au	1,077	1,026	1,176	1,104	1,887	0,996
Au	Cu	0,859	0,937	0,856	0,805	1,578	0,928
Ni	Fe	0,856	1,039	1,050	0,889	1,751	0,980
Fe	Ni	0,887	0,749	0,884	0,665	1,680	0,964

ее. Более того, не прослеживается какой-либо закономерности и в совместном влиянии значений двух величин, например:  $\varphi$  и  $\alpha$  или  $k$  и  $\alpha$ .

Вывод, какой может быть сделан из проведенного выше анализа, заключается, на наш взгляд, в необходимости учета в рамках модели по возможности всех факторов, которые могут оказать воздействие на прочность. Пренебрежение каким-либо из них (см. (2.3)–(2.5)) способно существенным образом изменить результат. Конечно, с увеличением числа параметров растет и сложность решения задачи, которое в отдельных случаях может быть рассмотрено аналитическими методами.

**5. Выводы.** На примере одномерной атомной модели хрупкого разрушения показана принципиальная возможность снижения прочности твердого тела, атомная решетка которого содержит примеси. Уровень снижения может достигать одного–двух порядков и определяется различиями в атомном взаимодействии. В условиях модели он может быть рассчитан по полученным формулам при наличии численных значений параметров потенциальной функции взаимодействия.

Снижение разрывной прочности атомной цепочки с примесью в случае расположения последней в вершине хрупкой трещины [7–9] способно резко уменьшить локальное сопротивление разрушению и привести к распространению трещины при нагрузках, существенно меньших теоретической прочности материала без примеси.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 95-01-00870).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Новожилов В. В., Слепян Л. И. Некоторые проблемы и достижения механики разрушения // Вестн. АН СССР. 1987. № 9. С. 96–111.
2. Физическое металловедение / Под. ред. Р. У. Кана и П. Хаазена. Т. 1. Атомное строение металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1987.
3. Thomson R. Physics of fracture // Solid State Physics. 1986. V. 39. P. 1–129.
4. Царегородцев А. И., Горлов Н. В., Демьянов Б. Ф., Старостенков М. Д. Атомная структура антифазной границы и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  // Физика металлов и металловедение. 1984. Т. 58, вып. 2. С. 336–343.
5. Paskin A., Sieradzki K., Som D. K., Dienes G. J. Dislocation enhancement and inhibition induced by films on crack surfaces // Acta Met. 1983. V. 31, N 8. P. 1253–1265.

6. Paskin A., Massoumzadeh B., Sieradzki K., Dienes G. J. Enhancement of dislocation generation induced by films on crack surfaces // *Scr. Met.* 1984. V. 18, N 10. P. 1135–1138.
7. Андреев А. В., Корнев В. М., Тихомиров Ю. В. Обрыв атомных связей в вершине трещины. Потеря устойчивости участка цепочки атомов // *Изв. РАН. МТТ.* 1993. № 5. С. 135–146.
8. Новожилов В. В. О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // *ПММ.* 1969. Т. 33, № 2. С. 212–222.
9. Новожилов В. В. К основам теории равновесных трещин в упругих телах // *ПММ.* 1969. Т. 33, № 5. С. 797–812.
10. Dimitrov V. I., Apostolov A. V., Belashtenko D. K. Effective atom-atom interaction in binary alloys // *Annuaire de l'Univ. de Sofia.* 1992. Т. 83/84. P. 175–181.

*Поступила в редакцию 20/III 1995 г.*

---