

УДК 539.3

## ОЦЕНКА СИЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЗАИЧНО ЗАРЯЖЕННЫХ ПЛОСКОСТЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ ОТНОСИТЕЛЬНОГО РАСПОЛОЖЕНИЯ

© Т.Н. Плужникова, А.В. Чиванов, В.А. Федоров

Pluzhnikova T.N., Chivanov A.V., Fedorov V.A. The analytical estimation of the forces of the interaction between tessellatedly charged planes depending on their relative arrangement. The method of computer-aided engineering carried out an estimation of the forces of the interaction between tessellatedly charged planes. It was shown that one of the reasons interfering with restitution cracks was the geometrical factor – detrusion and rotational displacement.

Известно [1], что в щелочногалоидных кристаллах наблюдается самопроизвольное залечивание трещин скола. Залеченный участок выявляется, как правило, в виде строчки дислокаций [2], что обусловлено несопадением рельефа соединяемых поверхностей. Несовпадение рельефа связано как с изгибом берегов трещины, так и с разворотом их на некоторый малый угол в плоскости движения трещины. Залечивание трещины без выявления строчек дислокаций при последующем травлении, по-видимому, результат совпадения поверхностей разрыва. Последние наблюдаются обычно вблизи вершин трещин. Геометрическое несопадение поверхностей разрыва может быть одной из причин, препятствующих реанимации нарушенных связей.

Цель работы: методом моделирования оценить изменения сил взаимодействия между поверхностями скола в ионных кристаллах в зависимости от их относительного расположения.

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Поверхности скола в ионных кристаллах можно представить, в первом приближении, как две бесконечные мозаично заряженные плоскости, ионами двух разных знаков, например, в кристаллах фтористого лития или хлористого натрия – это ионы двух сортов ( $\text{Li}^+$  и  $\text{F}^-$ ,  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$ ), которые взаимодействуют между собой по закону Кулона. На рис. 1 представлена схема расчета взаимодействующих плоскостей. Общая сила взаимодействия на разрыв равна:

$$F_z = F \cdot \cos \alpha,$$

где  $F_z$  – проекция силы  $F$  на ось  $z$  (сила на разрыв);  $F$  – сила взаимодействия между ионами соседних взаимодействующих плоскостей ( $(i, j)$  и  $(l, m)$  – номера ионов в первой и второй плоскости соответственно).

В модели определяли силу взаимодействия между плоскостями для кристаллов фтористого лития. Ионы в каждой плоскости жестко закреплены на расстояниях  $a$ , равных параметру решетки ( $a = 2 \cdot 10^{-10}$  м). Плоскости расположены на расстоянии  $a$  друг от друга в направлении  $[001]$ . В каждой из плоскостей задавали

последовательно количество атомов  $5 \times 5$  (по 25 в каждой плоскости),  $10 \times 10$ , ...,  $70 \times 70$  ионов.

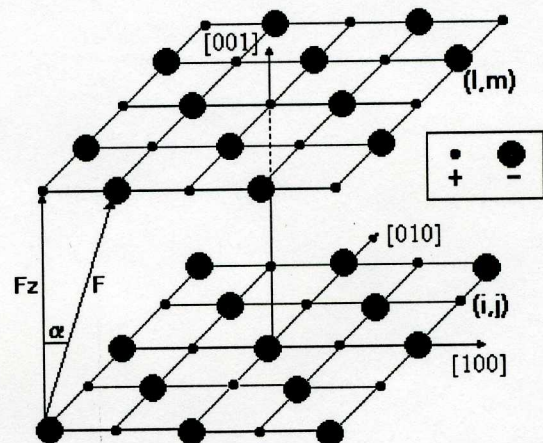


Рис. 1. Схема расчета силы взаимодействия между двумя плоскостями в ЦГК

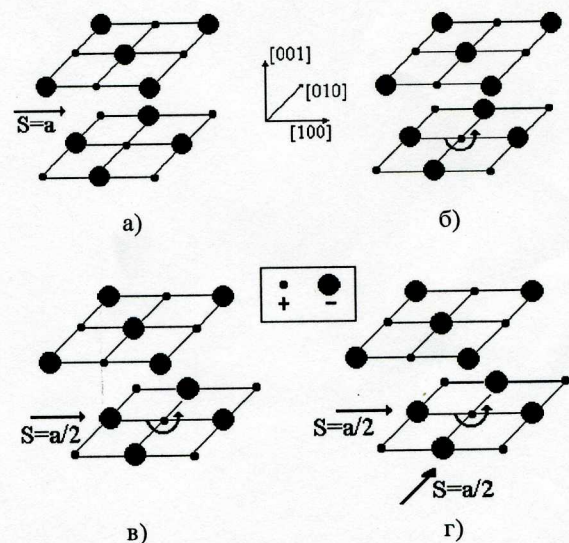


Рис. 2. Варианты смещения взаимодействующих плоскостей относительно друг друга.  $S$  – сдвиг в указанном направлении,  $a$  – параметр решетки



Исследовались несколько вариантов взаимодействия заряженных плоскостей:

1) определяли изменение силы взаимодействия плоскостей при их параллельном сдвиге друг относительно друга на несколько параметров решетки в направлении [100] (рис. 2а);

2) изменение силы взаимодействия при повороте одной из поверхностей относительно другой на угол до  $5^\circ$  с шагом  $6'$ , поворот проводили относительно оси, проходящей перпендикулярно через центр плоскостей (рис. 2б);

3) изменение силы взаимодействия при параллельном сдвиге одной из плоскостей на  $a/2$  в направлении  $a$  с последующим поворотом относительно другой плоскости на угол до  $5^\circ$  с шагом  $6'$  (рис. 2в);

4) изменение силы взаимодействия при параллельном сдвиге одной из плоскостей на  $a/2$  в двух взаимно перпендикулярных направлениях с последующим поворотом относительно другой плоскости на угол до  $5^\circ$  с шагом  $6'$  (рис. 2г).

### ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В рамках рассматриваемой модели видно, что уже при сдвиге плоскостей на малые доли параметра решетки, сила притяжения существенно изменяется. Так, при сдвиге на  $\sim 0,5a$  сила взаимодействия убывает на порядок (рис. 3). С увеличением числа ионов в плоскостях численное значение силы притяжения незначительно уменьшается, и при соотношении  $30 \times 30$  выходит на насыщение (без поворота). Восстановление ионных связей наиболее вероятно в случае, если параллельный сдвиг плоскостей будет равен четному числу параметров решетки. Результат расчета реально отражает физическую картину, так как при взаимодействии заряженных плоскостей без относительного сдвига, значение силы максимально и численно равно теоретической прочности на разрыв [3]. Разворот плоскостей до угла  $< 2^\circ$  сопровождается монотонным ходом зависимости (рис. 4). При углах разворота  $\sim 2^\circ$  сила взаимодействия убывает при числе ионов  $5 \times 5$  в 1,03 раза,  $30 \times 30$  – в 2,7 раза,  $50 \times 50$  и  $70 \times 70$  – в 100 раз. При увеличении числа ионов в плоскостях, сила взаимодействия становится более чувствительной к развороту.

При параллельном сдвиге плоскостей относительно друг друга на  $a/2$  в одном направлении (рис. 5), и при сдвиге одновременно на расстояние  $a/2$  в двух направлениях (рис. 6) с последующим поворотом, наблюдается значительное уменьшение силы по сравнению со значениями ее в исходном состоянии. Увеличение числа ионов во взаимодействующих плоскостях ведет к меньшим флуктуациям значений силы около нуля при развороте плоскостей относительно друг друга. Минимальное значение силы наблюдается при сдвиге на  $a/2$  в двух взаимно перпендикулярных направлениях. На рис. 7 приведена зависимость силы взаимодействия соседних плоскостей для  $N = 9800$  ионов для всех рассматриваемых вариантов с вращением (в каждой по 4900 ионов). Во всех моделируемых процессах наблюдаются флуктуации силы около нуля. При некоторых углах поворота сила притяжения может сменяться силой отталкивания (рис. 3–7).

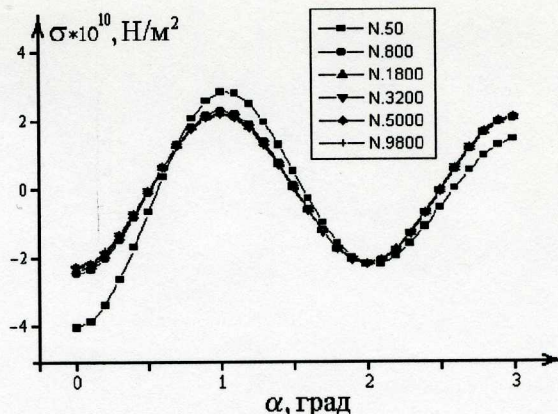


Рис. 3. Изменение силы взаимодействия между плоскостями при сдвиге на 3 параметра решетки вдоль [100]. Здесь и далее  $N$  – число ионов в двух взаимодействующих плоскостях

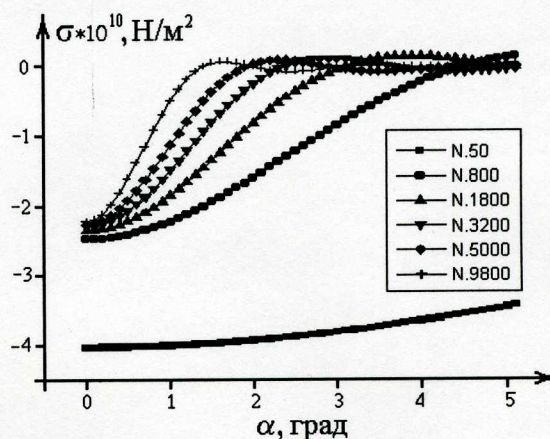


Рис. 4. Изменение силы взаимодействия между плоскостями, нормированной на единицу площади, при малых углах разворота заряженных плоскостей

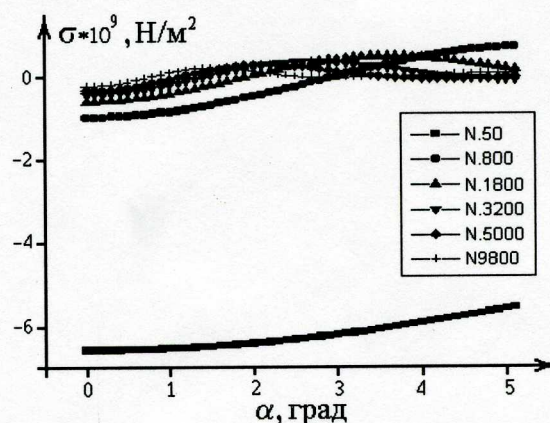


Рис. 5. Изменение силы взаимодействия между плоскостями, нормированная на единицу площади, при малых углах разворота заряженных плоскостей, и одновременном сдвиге одной из плоскостей на  $a/2$  по [100]



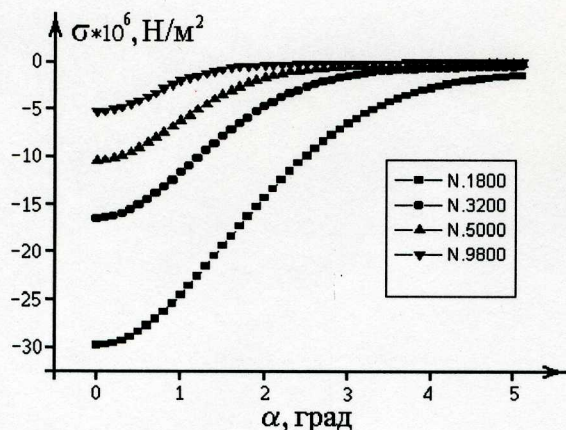


Рис. 6. Изменение силы взаимодействия между плоскостями, нормированной на единицу площади, при малых углах разворота заряженных плоскостей, при сдвиге одной из плоскостей на величину  $a/2$  во взаимно перпендикулярных направлениях [100] и [010]

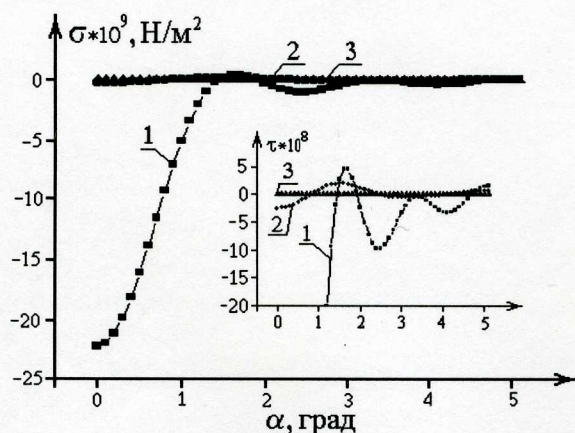


Рис. 7. Изменение силы взаимодействия между плоскостями, нормированной на единицу площади, при малых углах разворота заряженных плоскостей для  $N = 9800$ . 1) – без сдвига; 2) сдвиг на  $a/2$  в направлении [100]; 3) сдвиг на  $a/2$  по [100] и [010]

Расчетная модель носит, безусловно, качественный характер, так как рассчитано взаимодействие только  $\sim 10^4$  ионов в двух плоскостях, реальное же число взаимодействующих ионов на залеченном участке  $\sim 2 \cdot 10^{12}$ . В модели рассмотрен идеальный кристалл без дефектов, учет которых лишь незначительно понизит численные значения сил. Модель также не учитывает, что одновременно с разворотом происходит клинообразное раскрытие трещины по мере движения ее по кристаллу, что установлено экспериментально методом сверхскоростной фоторегистрации [4–6].

Одной из причин, препятствующих залечиванию трещин, может являться несовпадение мест разрыва, созданных вследствие параллельного смещения и разворота взаимодействующих плоскостей. Таким образом, показано, что сила взаимодействия мозаично заряженных поверхностей существенно зависит от их взаимного расположения и может изменяться на несколько порядков.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Шаскольская М.П., Ван Янь-Вэнь, Гу Шу-Чжао. О возникновении дислокаций при распространении и слиянии трещин в ионных кристаллах // Кристаллография. 1961. Т. 6. № 4. С. 605-613.
2. Финкель В.М., Конкин Б.Б. Виды дислокаций на залеченной трещине // ФТТ. 1983. Т. 25. № 5. С. 1553-1555.
3. Зуев Л.Б. Кристаллы: универсальность и исключительность // Соросов. образоват. журн. 1996. № 8. С. 93-102.
4. Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Тялин Ю.И., Белобородов П.Н. Кинетика роста и залечивания асимметричного скола // Вестн. Тамбов. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. Тамбов, 1998. Т. 3. № 3. С. 239-241.
5. Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Тялин Ю.И., Глушков А.Н. Кинетика самозалечивания трещин асимметричного скола // Современные проблемы прочности: Сб. науч. тр. III Междунар. семинара им. В.А. Лихачева, 20–24 сент. 1999 г. Старая Русса, 1999. Т. 2. С. 133-136.
6. Тялин Ю.И., Плужникова Т.Н., Чиванов А.В., Федоров В.А. Кинетика развития макротрещин в щелочногалоидных кристаллах // Вестн. Тамбов. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. Тамбов, 2002. Т. 7. № 1. С. 98-100.

БЛАГОДАРНОСТИ: Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №02-01-01173).

Поступила в редакцию 5 ноября 2002 г.