

УДК 539.3

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

© Т.Н. Плужникова

Россия, Тамбов, Государственный университет им. Г.Р. Державина

Pluzhnikova T.N. The analytical estimation of forces of interaction of tessellated and charged planes depending on their relative arrangement. The method of computer-aided engineering is used to carry out an estimation of forces of interaction of tessellated and charged planes. It is shown that one of the reasons interfering with restitution cracks is 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 несовпадением 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, является результатом совпадения поверхностей разрыва. Последние наблюдаются обычно вблизи вершин трещин. Геометрическое несовпадение поверхностей разрыва может быть одной из причин, препятствующих реанимации нарушенных связей.

Цель работы: методом моделирования оценить изменение сил взаимодействия между поверхностями скола в зависимости от их расположения в ионных кристаллах после раскола.

Поверхности скола в ионных кристаллах можно представить, в первом приближении, как две бесконечные моноатомные мозаично заряженные плоскости, ионами двух разных знаков, например, в кристаллах фтористого лития или хлористого натрия – это ионы двух сортов (Li^+ и F^- , Na^+ и Cl^-), которые взаимодействуют между собой по закону Кулона. Ионы в каждой плоскости жестко закреплены на расстояниях a , равных параметру решетки (для LiF $a = 2 \cdot 10^{-10}$ м). Расстояние между плоскостями кратно a . В каждой из плоскостей задавали последовательно 5×5 , 10×10 , ..., 50×50 ионов. Затем в центре одной из плоскостей выбирали квадрат единичной площади и оценивали силу взаимодействия его с другой плоскостью. В модели определяли силу взаимодействия между плоскостями для кристаллов фтористого лития.

Исследовались несколько случаев взаимодействия заряженных плоскостей: 1) изменение силы взаимодействия при параллельном сдвиге плоскостей друг относительно друга в пределах параметра решетки; 2) изменение силы взаимодействия при повороте одной из поверхностей относительно другой на угол до 5° с шагом $3'$; 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° с шагом $3'$; 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° с шагом $3'$.

В рамках рассматриваемой модели видно, что при сдвиге плоскостей на доли параметра решетки сила притяжения существенно уменьшается. Так, при сдвиге на $\sim 0,3a$ сила взаимодействия убывает на порядок. Это же относится и к силе отталкивания. С увеличением числа ионов в плоскостях численное значение силы притяжения незначительно уменьшается, и при соотношении 30×30 выходит на насыщение. 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]. При развороте плоскостей даже на малый угол $3'$ происходит резкое уменьшение сил взаимодействия между плоскостями. Дальнейшее увеличение угла разворота сопровождается монотонным уменьшением значений силы на 2 порядка. При углах разворота $\sim 5^\circ$ сила взаимодействия приближается к нулю. Причем это тем существеннее, чем большее число атомов находится в плоскости. Отмечено, что при повороте поверхностей наблюдается аномальное увеличение сил взаимодействия и отталкивания, например, при углах 3° и $4,2^\circ$. Эти всплески сил обусловлены геометрией системы взаимодействующих плоскостей и связаны с заданным шагом работы программы. При увеличении числа ионов в плоскостях максимальное значение силы уменьшается.

При параллельном сдвиге плоскостей относительно друг друга на $a/2$ в одном направлении и при сдвиге одновременно на расстояние $a/2$ в двух направлениях с последующим поворотом наблюдается резкое уменьшение амплитуды силы по сравнению со значениями

силы 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.

Данная 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 расстояние между плоскостями непостоянно по мере движения трещины по кристаллу.

Экстраполяция результатов расчета в область с большим числом взаимодействующих атомов показывает,

что при допущениях, принятых в работе, ошибка расчета не превышает 10 %.

Таким образом, показано, что одной из причин, препятствующих залечиванию трещин, является геометрический фактор – несовпадение мест разрыва, созданных вследствие параллельного смещения и разворота взаимодействующих плоскостей. При этом сила взаимодействия уменьшается на 2–3 порядка.

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 // Соросовский образовательный журнал. 1996. № 8. С. 93-102.