

УДК 539.375

## САМОПРОИЗВОЛЬНОЕ РАЗРУШЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

В. М. Корнев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Изучается разрушение твердых тел при воздействии поверхностно-активных веществ. Рассматривается предельный случай проявления хемосорбционных эффектов без существенного влияния механических напряжений. Описан рост плоских трещин в твердых средах с регулярными структурами при контакте с поверхностно-активными веществами, когда модель процесса — расклинивание трещин молекулярным клином. Получены оценки критического коэффициента интенсивности напряжений через критическое раскрытие трещины при расклинивании полубесконечным клином постоянной толщины. Получено аномально низкое сопротивление разделению твердого тела на части при определенных условиях (самопроизвольное разрушение).

**Введение.** Уточнение необходимого и достаточного критериев хрупкой прочности В. В. Новожилова [1] для кристаллических тел позволило количественно описать эффект Ребиндера [2–4].

В обзоре [5] обсуждается как самопроизвольное диспергирование твердых тел, так и облегчение механического диспергирования, однако основное внимание уделяется физико-химическим процессам. Ниже эти явления анализируются с точки зрения физико-химической механики, причем следует отметить, что “...тонкое измельчение в принципе не может быть чисто механическим процессом: связанное с развитием огромной новой поверхности оно обязательно требует вмешательства физико-химических факторов для управления явлениями на межфазных границах...” [5, с. 36].

Естественно использовать подход Нейбера — Новожилова [1, 6, 7] при формулировке критериев прочности для острых трещин в сплошных средах со структурой.

**1. Напряженные состояния в окрестности вершин трещин.** *Физико-химическое описание процесса разрушения.* Рассматриваются монокристаллы твердых тел с плоскими трещинами, имеющими прямолинейный фронт. Для упрощения плоские задачи о трещине анализируются для квадратной решетки Браве. Пусть приложенные на бесконечности к твердому телу растягивающие напряжения равны нулю:  $\sigma_\infty = 0$ . Продвижение трещины при  $\sigma_\infty = 0$  соответствует самопроизвольному разрушению твердого тела при воздействии поверхностно-активных веществ (ПАВ). Допустим, в трещине имеется водород (ПАВ), реагирующий с вновь образованной поверхностью твердого тела в вершине трещины, а образовавшиеся гидриды скапливаются на поверхности трещины в окрестности ее вершины. Достаточно подробный анализ этого случая при действии растягивающих напряжений ( $\sigma_\infty \neq 0$ ) выполнен в [3], при этом для трещин нормального отрыва использовались предположения, что силы межатомного взаимодействия в окрестности вершины трещины отсутствуют и изменением объема при образовании гидридов и прочностью гидридов в вершине трещины можно пренебречь. Откажемся от последнего допущения, тогда образовавшиеся гидриды в окрестности вершины трещины можно смоделировать молеку-

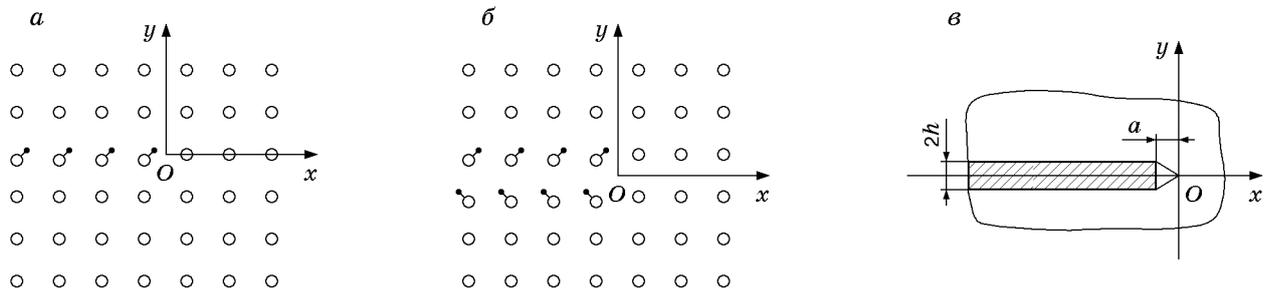


Рис. 1

лярным клином. Напряженно-деформированное состояние в окрестности кончика трещины определяется этим клином при отсутствии нагрузки ( $\sigma_\infty = 0$ ).

Подобная постановка целесообразна, когда изучается самопроизвольное разрушение твердых тел (см. [5, с. 33–36]). Так, существует проблема выбора конструкционных материалов стенок камер, подвергающихся радиационному облучению [8]. Эффект деформации поверхности и образования вздутий получил название радиационного блистеринга (вспучивания) [8]. После образования вздутий происходит шелушение поверхности при отсутствии внешних нагрузок. При гидрировании металлического титана возможно самопроизвольное разрушение: растворение водорода в толще металла сопровождается увеличением объема полученного твердого продукта по сравнению с исходным объемом чистого металла [9, с. 31–37].

Для плоского случая простейшая схема такого клина приведена для квадратной решетки Браве на рис. 1. На рис. 1, *a, б* атомы монокристалла вещества показаны кружками, атомы водорода — точками. На рис. 1, *a, б* изображены физические модели монокристаллов с молекулярным клином, состоящим из одного и двух рядов молекул гидридов соответственно, на рис. 1, *в* — механическая модель тела с трещиной, в которую вставлен клин постоянной толщины (трещина в механических моделях моделируется двусторонним разрезом). Здесь  $2h$  — толщина клина,  $a$  — расстояние от конца клина до вершины. Рассматривается только правая вершина трещины. Расположение декартовой системы координат согласовано с расположением правой вершины трещины в физических моделях либо правой вершины разреза в механических моделях. Предложенная простейшая модель соответствует образованию молекулярных клиньев вдоль плоскостей решетки монокристалла. Общий случай произвольного расположения клина относительно кристаллической решетки здесь не рассматривается.

Пусть ПАВ (водород) хемосорбируется внутри трещины и образуется новое достаточно устойчивое соединение. Гидриды могут иметь постоянный или переменный молекулярный состав [10–12]. Допустим, минимальный диаметр молекулы этого соединения превосходит постоянную кристаллической решетки монокристалла исходного вещества  $r_e$ . Далее величина  $r_e$  сравнивается с постоянной кристаллической решетки монокристалла гидрида  $r_e^*$ , а диаметр молекулы гидрида определяется химической формулой гидрида. Один или два слоя молекул вновь образованного соединения могут образовать подобие молекулярного клина (число слоев молекул гидридов определяется временем протекания химической реакции на вновь образованной поверхности). При  $\sigma_\infty = 0$  вещество молекулярного клина сжато, и, вообще говоря, существенных ограничений на прочность этого вещества не налагается.

В зависимости от положения вновь образованного соединения или гидрида относительно вершины трещины диаметры их молекул могут играть роль как силового моста при действии нагрузок на тело с трещиной [4, 13], так и молекулярного клина при отсутствии нагружения тела с трещиной.

Оценим толщину молекулярного клина, сформированного гидридами  $\text{TiH}_2$  в монокристалле  $\text{Ti}$ . “При поглощении водорода титаном увеличивается объем материала... Последнее приводит к образованию микротрещин в материале, которые, сливаясь в макротрещины, вызывают разрушение титана. Трещины проходят по зерну и по местам скопления гидридов” [9, с. 18]. Для толщины молекулярного клина  $2h$  имеем соотношения

$$2h \simeq r_e^* - r_e, \quad 2h/r_e \simeq r_e^*/r_e - 1; \quad (1.1)$$

$$2h \simeq 2r_e^* - 2r_e, \quad 2h/r_e \simeq 2(2r_e^*/r_e - 1), \quad (1.2)$$

где  $r_e = 2,92 \cdot 10^{-10}$  м,  $r_e^* = 4,45 \cdot 10^{-10}$  м — постоянные атомных решеток монокристаллов  $\text{Ti}$  и  $\text{TiH}_2$  соответственно [11, 14]. Соотношения (1.1) и (1.2) выписаны для молекулярных клиньев, состоящих из одного и двух рядов молекул гидрида  $\text{TiH}_2$  соответственно, а расстояние от концов клиньев до вершин трещин  $a \approx r_e$  (рис. 1, *a, б*). Толщина молекулярного клина, рассчитанная по соотношениям (1.1) и (1.2) для монокристаллов  $\text{Ti}$  и  $\text{TiH}_2$ , оказывается значительной, так как конец клина расположен очень близко к вершине трещины ( $a \approx 2,92 \cdot 10^{-10}$  м). В соотношениях (1.1), (1.2) используются знаки “ $\simeq$ ”, так как расстояния между атомами в тонком слое гидрида  $\text{TiH}_2$  могут отличаться от постоянной решетки  $r_e^*$  монокристалла  $\text{TiH}_2$ , а расстояния между атомами монокристалла  $\text{Ti}$  в окрестности повреждения, вызванного молекулярным клином, могут отличаться от постоянной кристаллической решетки идеального монокристалла  $\text{Ti}$ . Соотношения (1.1) и (1.2) справедливы и для других веществ, гидриды которых содержат два атома водорода.

*Расклинивание трещин молекулярным клином в механической модели.* Воспользуемся представлениями решений для напряжений на продолжении острой трещины  $y = 0$  в плоской задаче теории упругости через коэффициент интенсивности напряжений  $K_I^0$ . Тогда для трещин нормального отрыва в окрестности вершины трещины с точностью до величин высшего порядка малости для линейной задачи можно записать

$$\sigma_y(x, 0) \simeq \sigma_\infty + K_I^0 / (2\pi x)^{1/2}, \quad (1.3)$$

где  $\sigma_\infty = 0$  — характерные напряжения, заданные на бесконечности. Итак, напряженно-деформированное состояние тела с полубесконечной трещиной определяется только молекулярным клином.

Соотношение для  $K_I^0$  для острой полубесконечной трещины при расклинивании тела полубесконечным клином постоянной толщины при отсутствии трения запишем в виде [15, с. 49, 50]

$$K_I^0 = \frac{4Gh}{1 + \varkappa} \sqrt{\frac{2}{\pi a}}. \quad (1.4)$$

Здесь  $G$  — модуль сдвига;  $\varkappa = 3 - 4\nu$  для плоского деформированного состояния;  $\varkappa = (3 - \nu)/(1 + \nu)$  для плоского напряженного состояния;  $\nu$  — коэффициент Пуассона. В соотношении (1.4) используются постоянные  $G$ ,  $\nu$  для монокристалла исходного вещества.

**2. Критерий хрупкого разрушения.** Изучаются трещиноватые монокристаллы металлов, имеющие вакансии. Рассматривается дискретно-интегральный критерий хрупкой прочности (двумерный случай) для слабейшего монослоя атомов для острых трещин нормального отрыва [3]

$$\frac{1}{kr_e} \int_0^{nr_e} \sigma_y(x, 0) dx \leq \delta\sigma_m. \quad (2.1)$$

Здесь  $\sigma_y$  — нормальные напряжения в вершине трещины (эти напряжения действуют в толще монокристалла вещества с трещиной);  $Oxy$  — прямоугольная система координат (рис. 1);  $r_e$  — расстояние между центрами атомов исходного вещества;  $n$  и  $k$  — целые

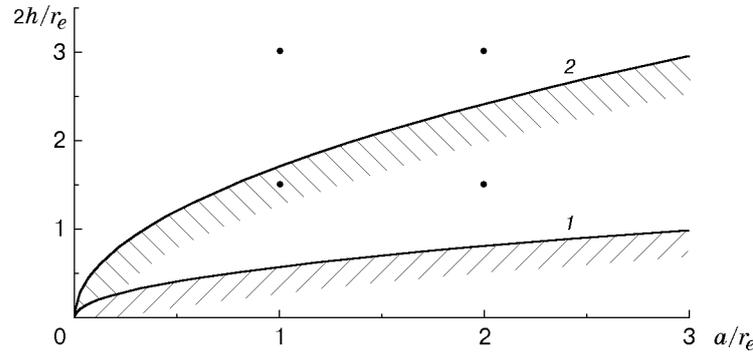


Рис. 2

числа ( $n \geq k$ );  $k$  — число межатомных связей;  $nr_e$  — интервал осреднения;  $\sigma_m$  или  $\delta\sigma_m$  — теоретические прочности при отсутствии [16] или наличии ПАВ в трещине соответственно;  $\delta \leq 1$  — параметр. Параметр  $\delta$  описывает химически усиливаемое разрушение: в присутствии ПАВ теоретическая прочность исходного вещества может уменьшаться.

Выполнив соответствующие преобразования (см. (2.1) и (1.3)) для острой трещины нормального отрыва при наличии вакансий в носике трещины, имеем оценку критического коэффициента интенсивности напряжений  $K_I^{*0}$

$$K_I^{*0} \leq (k\delta\sigma_m/n)(\pi nr_e/2)^{1/2}. \quad (2.2)$$

После подстановки выражения (1.4) в соотношение (2.2) получим оценку для критической толщины клина постоянной толщины  $2h^*$

$$\frac{2h^*}{r_e} \leq (1 + \varkappa)(1 + \nu) \frac{\pi}{2} \frac{k}{\sqrt{n}} \frac{\delta\sigma_m}{E} \sqrt{\frac{a}{r_e}}. \quad (2.3)$$

С учетом оценки теоретической прочности монокристалла [16]  $\sigma_m = \eta E$  ( $0,1 \lesssim \eta \lesssim 0,3$ ) выражение (2.3) принимает вид  $2h^*/r_e \leq C\eta\sqrt{a/r_e}$ , где  $C = \text{const}$ . Для монокристалла Ti постоянная  $C_{Ti} = 5,71$  для плоского деформированного состояния и  $C_{Ti} = 6,29$  для плоского напряженного состояния при отсутствии вакансий ( $k = n = 1$ ). Коэффициент Пуассона монокристалла Ti принят равным коэффициенту Пуассона технических сплавов Ti, т. е.  $\nu_{Ti} = 0,3$ .

На рис. 2 представлена зависимость, характеризующая поведение системы. Кривые 1 и 2, полученные для уравнения  $2h/r_e = C\eta\sqrt{a/r_e}$  при  $\eta = 0,1; 0,3$  соответственно, отделяют области устойчивости (заштрихованы) от областей неустойчивости. На рис. 2 показаны некоторые точки, характеризующие поведение монокристалла Ti при наличии молекулярного клина. Если точка  $(a_0/r_e, 2h_0/r_e)$  на плоскости попадает в область устойчивости, то продвижения трещины не происходит. Если точка  $(a_0/r_e, 2h_0/r_e)$  на плоскости попадает в область неустойчивости, то трещина продвигается на одно межатомное расстояние  $r_e$ .

Пусть точка  $(a_0/r_e, 2h_0/r_e)$  попадает в область неустойчивости. После продвижения трещины изменяется величина  $a_0 + r_e$ , характеризующая расстояние от конца клина до новой вершины трещины (ПАВ реагирует с вновь образованной поверхностью монокристалла с некоторым запозданием). Анализируется поведение системы в точке  $((a_0 + r_e)/r_e, 2h_0/r_e)$  и т. д.

Пусть ПАВ, поступающее в трещину, реагирует с вновь образованной поверхностью монокристалла. Если принимать во внимание химическую реакцию ПАВ с атомами монокристалла в окрестности вершины трещины, то величина  $a_0 + r_e$  уменьшается, и конец клина продвигается к вершине трещины.

Очевидно, что для достаточно толстого клина всегда имеет место продвижение трещины при фиксированном расстоянии от конца клина до вершины трещины, однако без учета химической реакции ПАВ с вновь образованной поверхностью всегда наблюдается остановка трещины из-за увеличения указанного расстояния.

Расчеты для монокристалла Ti показывают, что из точек  $(a_0/r_e, 2h_0/r_e) = (1; 1,52), (2; 1,52), (1; 3,05), (2; 3,05)$  две точки  $(1; 1,52), (2; 1,52)$  попадают в область устойчивости при  $\eta = 0,3$ . Четыре указанные точки приведены на рис. 2. При малых расстояниях от конца клина до вершины трещины ( $a_0/r_e \leq 2$ ) для молекулярных клиньев TiH<sub>2</sub>, состоящих из более чем двух рядов молекул, всегда имеет место разрушение.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Новожилов В. В.** О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // Прикл. математика и механика. 1969. Т. 33, вып. 2. С. 212–222.
2. **Корнев В. М., Разворотнева Л. И.** Сравнительные оценки прочности сухого и влажного кварца при измельчении // ПМТФ. 1998. Т. 39, № 1. С. 138–144.
3. **Корнев В. М.** Снижение прочности металлов при хемосорбции водорода в вершине трещины // ПМТФ. 1998. Т. 39, № 3. С. 173–178.
4. **Kornev V. M., Razvorotneva L. I.** Brittle fracture of cracked solids as affected by surfactants // Damage and fracture mechanics. Computer aided assessment and control. Southampton; Boston: Comput. Mech. Publ., 1998. P. 565–574.
5. **Ребиндер П. А., Шукин Е. Д.** Поверхностные явления в твердых телах в процессах их деформации и разрушения // Успехи физ. наук. 1972. Т. 108, вып. 1. С. 3–42.
6. **Нейбер Г.** Концентрация напряжений. М.; Л.: Гостехтеоретиздат, 1947.
7. **Корнев В. М.** Иерархия критериев прочности структурированных хрупких сред. Сателлитное зарождение микротрещин // ПМТФ. 2000. Т. 41, № 2. С. 177–187.
8. **Калин Б. А., Скоров Д. М., Якушин В. Л.** Проблемы выбора материалов для термоядерных реакторов. Радиационная эрозия. М.: Энергоатомиздат, 1985.
9. **Рубцов А. Н., Олесов Ю. Г., Антонова М. М.** Гидрирование титановых материалов. Киев: Наук. думка, 1971.
10. **Гельд П. В., Рябов Р. А., Мохрачева Л. П.** Водород и физические свойства металлов и сплавов. Гидриды переходных металлов. М.: Наука, 1985.
11. **Антонова М. М.** Свойства гидридов металлов: Справ. Киев: Наук. думка, 1975.
12. **Wells A. F.** Structural inorganic chemistry. Oxford: Clarendon Press, 1986.
13. **Томсон Р.** Физика разрушения // Атомистика разрушения: Сб. ст. 1983–1985 гг. / Сост. А. Ю. Ишлинский. М.: Мир, 1987. С. 104–144.
14. **Шульце Г.** Металлофизика. М.: Мир, 1971.
15. **Механика разрушения и прочность материалов: В 4 т. Т. 2.** Коэффициенты интенсивности напряжений в телах с трещинами / М. П. Саврук. Киев: Наук. думка, 1988.
16. **Макмилан Н.** Идеальная прочность твердых тел // Атомистика разрушения: Сб. ст. 1983–1985 гг. / Сост. А. Ю. Ишлинский. М.: Мир, 1987. С. 35–103.

*Поступила в редакцию 8/VI 2000 г.*