УДК 539.

УПРУГОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ КВАЗИХРУПКОМ РАЗРУШЕНИИ ПОЛИМЕРОВ И КОМПОЗИТОВ НА ИХ ОСНОВЕ

А.В. Валишин, профессор, Т.С. Миронова, соискатель

кафедра Высшей и прикладной математики МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия

e-mail: enf@mail.ru, st.m@list.ru

Статья посвящена описанию механизма упругого взаимодействия локальных микродефектов, названных дырками, которые образуются и накапливаются в зоне вынужденной эластичности перед фронтом трещины разрушения в полимерах. Рассматриваются аморфные стеклообразные полимеры типа полиметилметакрилата. Рассчитаны упругие поля дырок, их собственная упругая энергия, энергия взаимодействия дырок и сила их парного взаимодействия. Взаимодействие дырок приводит к тому, что каждая дырка окружена «атмосферой» более мелких дырок. Показано, что фронт трещины является источником собственного упругого поля. Показано, что дырки диффундируют навстречу фронту трещины. Рассчитан диффузионный поток дырок.

Ключевые слова: *локальные микродефекты – дырки, упругие поля дырок, диффузия дырок.*

Эта работа является продолжением работ [1, 2].

1. Разрушение твердых тел и, в частности, полимеров и композитов на их основе – это процесс накопления внутренних микроповреждений до некоторого критического состояния. Этот процесс локализован преимущественно в слабых местах структуры материала, где возникают очаги перенапряжений, в которых механическое напряжение значительно больше, чем вдали от них. Такими очагами являются, в первую очередь, микро и макротрещины. В температурном диапазоне между температурой хрупкости и температурой квазихрупкости в линейных полимерах перед фронтом трещины под влияниям высоких напряжений развивается вынужденная эластическая деформация, и образуется зона вынужденной эластичности. Локальные микроповреждения накапливаются, в первую очередь, в этой зоне.

Как было показано в работе [1], при элементарном акте разрыва в месте происшествия возникает локальная элементарная деформация типа расширения, а при элементарном акте рекомбинации – элементарная деформация типа стягивания. Эта деформация локализована в малом объеме υ_0 около точки происшествия. По порядку величины объем υ_0 равен объему, занимаемому кинетической единицей, участвовавшей в элементарном акте, т. е. объему одной или нескольких химических связей, если флуктуационный элементарный акт был групповой. Определим упругое состояние, возникающее вследствие происшествия одного элементарного акта. Поместим начало координат в точку происшествия и сделаем простейшее естественное предположение, что упругое поле смещений, порождаемое элементарным актом, сферически симметрично. Это означает, что вектор смещения $\vec{u}$ равен:

$$\vec{u}(r) = u_r(r)\frac{\vec{r}}{r} \tag{1}$$

т.е. он зависит только от расстояния r до центра и направлен вдоль радиус-вектора. При этом для элементарного акта разрыва функция $u_r(r) > 0$, а для акта рекомбинации $u_r(r) < 0$. Для определения поля смещений воспользуемся уравнением равновесия упругой среды, записанным в перемещениях:

$$\left(K + \frac{1}{3}G\right) grad\, div\, \vec{u} + G\Delta\vec{u} = 0 \tag{2}$$

где K – модуль объемного сжатия, G – модуль сдвига, Δ – оператор Лапласа. Подставляя сюда (1), после преобразований получим:

$$r^2\frac{d^2u_r}{dr^2} + 2r\frac{du_r}{dr} - 2u_r = 0 \tag{3}$$

Это известное уравнение Эйлера. Его общее решение равно:

$$u_r(r) = \frac{C_1}{r^2} + C_2 r \tag{4}$$

Из условия, что при $r \to \infty$ $u_r(r) \to 0$, следует, что константа $C_2 = 0$. Имеем после этого:

$$u_r(r) = \frac{C}{r^2} \tag{5}$$

и значит, вектор смещения будет:

$$\vec{u}_r(r) = \frac{C}{r^3}\vec{r} \qquad \text{а)}$$

или (6)

$$\vec{u}(r) = -C\, grad\frac{1}{r} \qquad \text{б)}$$

Элементарные акты разрушения (и разрыва, и рекомбинации) вызывают дополнительные силы, действующие со стороны возникшего дефекта на ближайшее окружение. С макроскопической точки зрения, это эквивалентно наличию некоторой объемной силы, приложенной в месте расположения дефекта. Чтобы найти объемную плотность $\vec{f}$ этих сил, воспользуемся уравнением равновесия в виде:

$$\left(K+\frac{1}{3}G\right)grad\,div\vec{u}+G\Delta\vec{u}+\vec{f}=0 \qquad (7)$$

Подставляя сюда (6), после преобразований получим выражение (8):

$$\vec{f}=-4\pi C\left(K+\frac{4}{3}G\right)grad\,\delta(\vec{r}) \qquad (8)$$

Здесь использовано соотношение:

$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta(\vec{r}) \qquad (9)$$

где $\delta(\vec{r})$ – трехмерная дельта-функция.

Константа C в (8) является мерой «мощности» сингулярности, которую порождает элементарный акт, она полностью определяется величиной объема υ_0. Действительно, изменение объема среды, вызванное полем смещения (6), равно:

$$\upsilon_0=\int div\,\vec{u}\,dV=-C\int div\,grad\frac{1}{r}dV=-C\int\Delta\left(\frac{1}{r}\right)dV=C\int 4\pi\delta(\vec{r})dV=4\pi C \qquad (10)$$

Интегрирование здесь производится по всему объему среды, в данном случае по объему эластической зоны. Но так как поле смещений (5) быстро убывает с расстоянием от центра, то фактически интегрирование распространяется только на ближайшую окрестность центра. Таким образом, объем υ_0 – это объем сферы действия элементарного акта, можно сказать, что υ_0 – это объем одного элементарного акта (разрыва или рекомбинации). Из формулы (10) тогда следует, что константа ***C*** с точностью до множителя равна объему элементарного акта, т.е.

$$C=\frac{1}{4\pi}\upsilon_0 \qquad (11)$$

Таким образом, элементарные акты разрыва и рекомбинации локально изменяют объем окрестности места происшествия. Подставив теперь значение константы ***C***, получим:

$$\vec{u}(\vec{r})=\frac{1}{4\pi}\frac{\upsilon_0}{r^3}\vec{r} \quad \text{а)}$$

$$\vec{u}(\vec{r})=\frac{1}{4\pi}\upsilon_0 grad\frac{1}{r} \quad \text{б)} \qquad (12)$$

$$\vec{f}(\vec{r})=-\upsilon_0\left(K+\frac{4}{3}G\right)grad\,\delta(\vec{r}) \quad \text{в)}$$

При элементарном акте рекомбинации созданная им деформация связана со смещением ближайших атомов навстречу друг другу, стремясь как бы «залечить» образовавшийся дефект. При элементарном акте разрыва, наоборот, смещение ближайших атомов направленно от центра из-за декомпенсации сил межатомного притяжения. Иными словами, для элементарного акта разрыва константу ***C*** и элементарный объем υ_0 нужно считать положительными, а при акте рекомбинации – отрицательными.

Локальное поле упругого смещения, возникающее при элементарных актах, порождает такие же локальнее поля деформаций и перемещений. Локальная деформация, возникающая при элементарных актах, определяется через поле смещений обычным образом:

$$\eta_{ik}=\frac{1}{2}\left(\nabla_i u_k+\nabla_k u_i\right) \qquad (13)$$

где символом набла обозначен оператор дифференцирования по пространственным координатам: $\nabla_i=\frac{\partial}{\partial x_i}$. Подставляя сюда (12), получаем:

$$\eta_{ik}=\frac{\upsilon_0}{4\pi}\left(\frac{\delta_{ik}}{r^3}-3\frac{x_i x_k}{r^5}\right) \qquad (14)$$

Здесь δ_{ik} – известный символ Кронекера (единичный тензор второго ранга), а x_i – координаты радиус-вектора $\vec{r}$, исходящего из места происшествия элементарного акта в точку наблюдения. Из этой формулы, в частности, видно, что след тензора элементарной деформации $\eta_{kk}=0$, что означает, что эта деформация представляет собой чистый сдвиг. Для того, чтобы получить элементарный тензор напряжений, воспользуемся законом Гука:

$$T_{ik}=K\eta_{ll}\delta_{ik}+2G\left(\eta_{ik}-\frac{1}{3}\eta_{ll}\delta_{ik}\right) \qquad (15)$$

Подставим предыдущую формулу, получаем тензор напряжений:

$$T_{ik}=\frac{\upsilon_0}{2\pi}G\left(\frac{\delta_{ik}}{r^3}-3\frac{x_i x_k}{r^5}\right) \qquad (16)$$

Отсюда также видно, что поле напряжений чисто сдвиговое.

Необходимо сделать два важных замечания. Во-первых, упругое состояние элементарного акта (т. е. поля смещений, деформаций и напряжений) локально, т.е. сосредоточено в малой окрестности точки его происшествия. Во-вторых, локальные акты разрыва и рекомбинации происходят флуктуационно, т.е. случайно. Из этого следует, что возникающее при этом упругое поле смещений, деформаций и напряжений тоже случайно флуктуируют во времени и пространстве.

В теории упругости источник упругого состояния, описываемый приведенными выше формулами (плотность объемных сил, смещения, деформации и напряжения) называется центром дилатации [3, 4]. Таким образом, каждый элементарный акт разрушения создает случайный временный центр дилатации, имеющий некоторое конечное время существования.

2. Дырки в эластической зоне возникают в результате флуктуационного распада слабых узлов несущего каркаса и являются стабильными дефектами, создавая собственное упругое поле. Слабый узел, расположенный в некоторой точке M, т.е. потенциальная дырка в этой точке содержит $\delta n_0(M)=\Omega\rho_0(M)\delta V(M)$ несущих элементов, каждый из которых при элементарном акте разрыва создает центр дилатации. Поэтому дырка эквивалентна скоплению δn_0 точечных центров дилатации. Их упругие поля, т.е. смещения, деформации и напряжения, аддитивно складываются. При этом дырка может иметь неправильную форму, не обязательно сферическую. Если поместить начало координат в какую-либо геометрическую точку дырки – «центр» дырки, то упругое поле смещений, создаваемое дыркой, будет:

$$u_i(\vec{r})=-\frac{1}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0\Omega_{ik}\nabla_k\left(\frac{1}{r}\right) \qquad (17)$$

Здесь симметричный тензор $\Omega_{ik}=\Omega_{ki}$ – форм-фактор дырки, характеризует геометрическую форму дырки. Как и всякий симметричный тензор второго ранга, он может быть приведен к главным осям. Направление главных осей и величины главных значений тензора Ω_{ik} характеризуют отличие формы дырки от сферической. Для симметричной сферической дырки все три главных значения равны и форм-тензор Ω_{ik} в любой системе координат пропорционален единичному тензору. Можно просто положить $\Omega_{ik}=\delta_{ik}$ Различные случаи неравенства главных значений определяют разную степень отличия дырки от сферической формы. В принципе дырка может иметь сколь угодно сложную форму, вплоть до чечевицеобразной внутренней субмикротрещины.

Собственное поле деформаций дырки получается подстановкой формулы (17) в выражение типа (13):

$$\varepsilon_{ik}=\frac{1}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0\left(\frac{\Omega_{ik}}{r^3}-3\Omega_{ij}\frac{x_jx_k}{r^5}\right) \qquad (18)$$

Собственное поле напряжений получаем, используя закон Гука:

$$\sigma_{ik}=\frac{1}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0\left(\left(\left(K-\frac{2}{3}G\right)\Omega_{nn}\delta_{ik}+2G\Omega_{ik}\right)\frac{1}{r^3}-3\left(\left(K-\frac{2}{3}G\right)\Omega_{lj}\delta_{ik}+2G\Omega_{ik}\delta_{lk}\right)\frac{x_jx_k}{r^5}\right) \qquad (19)$$

След тензоров деформации и напряжения дырки равны:

$$\varepsilon_{kk}=\frac{1}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0\left(\frac{\Omega_{kk}}{r^3}-3\Omega_{kj}\frac{x_jx_k}{r^5}\right) \text{ а)}$$

$$\sigma_{kk}=\frac{3K}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0\left(\frac{\Omega_{kk}}{r^3}-3\Omega_{jk}\frac{x_jx_k}{r^5}\right) \text{ б)} \qquad (20)$$

Неравенство нулю следа тензора деформаций говорит о том, что, в отличие от упругого поля одиночного центра дилатации, собственное упругое поле не симметричной (не сферической) дырки не является чисто сдвиговым – в каждой точке области своего действия это поле вызывает изменение объема упругой среды. След тензора напряжений определяет в каждой точке среднее гидростатическое давление:

$$p_0=-\frac{1}{3}\sigma_{kk}=-\frac{K}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0\left(\frac{\Omega_{kk}}{r^3}-3\Omega_{jk}\frac{x_jx_k}{r^5}\right) \qquad (21)$$

Отличие тензора напряжений (19) от этого выражения свидетельствует о наличии в среде сдвиговых напряжений, создаваемых дыркой.

Если дырка симметричная (сферическая) то $\Omega_{ij}=\delta_{ij}$ и

$$\varepsilon_{ik}=\frac{1}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0\left(\frac{\delta_{ik}}{r^3}-3\frac{x_ix_k}{r^5}\right) \text{ а)}$$

$$\sigma_{ik}=\frac{1}{2\pi}G\upsilon_0\delta n_0\left(\frac{\delta_{ik}}{r^3}-3\frac{x_ix_k}{r^5}\right) \text{ б)} \qquad (22)$$

В этом случае собственное упругое поле дырки чисто сдвиговое $\varepsilon_{kk}=\sigma_{kk}=0$ и вызывает в каждой точке только изменение формы, но не объема. Таким образом, сферическая дырка эквивалентна центру дилатации, только увеличенной мощности.

Мы установили, что дырка является источником собственного упругого поля, которое описывается вышеприведенными формулами для смещений, деформаций и напряжений.

Упругое поле дырки формируется по мере распада соответствующего слабого узла несущего каркаса. Дырка является стабильным дефектом, ее упругое поле стабильно и не подвержено случайным флуктуациям.

Вычислим энергию собственного упругого поля дырки. Ограничимся сферической, симметричной дыркой. Рассмотрение общего случая несимметричной дырки резко усложняет промежуточные алгебраические преобразования, не внося ничего нового в окончательные выводы. Как известно, плотность упругой энергии деформированного тела равна:

$$\phi = \frac{1}{2}\varepsilon_{ik}\sigma_{ik} \tag{23}$$

Подставив сюда выражение (22), после преобразований получим:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{3}{8\pi^2}\upsilon_0^2(\delta n_0)^2\frac{G}{r^6} \tag{24}$$

Видно, что плотность упругой энергии поля дырки быстро убывает с расстоянием от нее. Кроме того, она сильно зависит от мощности слабого узла, на месте которого возникла. Проинтегрировав теперь по всему окружающему дырку объему, получим полную энергию собственного упругого поля дырки:

$$\Phi = \int \phi(\vec{r})dV = \frac{3}{8\pi^2}\upsilon_0^2(\delta n_0)^2 G\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta \int_a^{\infty}\frac{dr}{r^4} = \frac{1}{2\pi}(\upsilon_0\delta n_0)^2\frac{G}{a^3} \tag{25}$$

Здесь интегрирование ведется по сферическим координатам и a – диаметр дырки. Из этих формул видно, что 90% энергии собственного поля дырки сосредоточено в ее окрестности радиусом, равным удвоенному диаметру дырки $2a$. Это означает, что сфера влияния дырки простирается не больше чем на два ее диаметра. Этот вывод остается в силе и для дырки произвольной формы.

Итак, мы установили, что дырка является источником внутренних напряжений. С макроскопической точки зрения она эквивалентна распределению объемных сил с плотностью:

$$f_i = -\left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0\Omega_{ik}\nabla_k\delta(\vec{r}) \quad \text{а)}$$

для сферической дырки: (26)

$$f = -\left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0\, grad\,\delta(\vec{r}) \quad \text{б)}$$

Здесь $\vec{r}$ – радиус-вектор в точку наблюдения, исходящий из некоторого центра дырки, куда помещено начало координат.

Свойство дырки играть роль источника упругого поля является основным при описании в дальнейшем взаимодействия дырок. Для этого необходимо переписать формулу (26), перейдя в ту систему координат, в которой мы рассматриваем эластическую зону. В этой системе начало координат находится в вершине трещины, а ось абсцисс направлена перпендикулярно фронту трещины. Если дырка находится в некоторой точке M, то ее положение определяется радиус-вектором $\vec{r}_0$. Точка наблюдения определяется радиус-вектором $\vec{r}$. Тогда плотность объемных сил, создаваемых дыркой в точке $M(\vec{r}_0)$, запишется так:

$$\vec{f}(\vec{r}/M) = -\left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)grad\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \tag{27}$$

Образование дырки, т.е. микрополости в среде эластической зоны вызывает локальное изменение силовых связей между соседними атомами в ближайшей окрестности дырки. Силовые межатомные связи определяют, в конечном итоге, модули упругости среды. Поэтому при макроскопическом описании дырки изменение силовых связей можно смоделировать локальным изменением упругих модулей. Для изотропной среды тензор модулей упругости C_{ijkl} равен [5]

$$C_{ijkl} = \left(K - \frac{2}{3}G\right)\delta_{ij}\delta_{kl} + G\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) \tag{28}$$

т.е. в этом случае упругое состояние характеризуется двумя константами – модулем объемного сжатия K и модулем сдвига G. Возмущенный тензор упругости запишем в виде:

$$C'_{ijkl} = C_{ijkl} + \vartheta\Delta C_{ijkl}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0), \tag{29}$$

где возмущение C_{ijkl} равно:

$$\Delta C_{ijkl} = \left(\Delta K - \frac{2}{3}\Delta G\right)\delta_{ij}\delta_{kl} + \Delta G\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) \tag{30}$$

В этих формулах ΔK и ΔG – возмущения объемного модуля и модуля сдвига; ϑ – множитель размерности объема, по порядку величины он равен объему дырки, $\vartheta \approx \delta V$; дельта-функция показывает, что возмущение упругих модулей локализовано в точке $M(\vec{r}_0)$, т.е. в месте нахождения дырки.

Таким образом, дырка выступает в двух качествах: как сосредоточенный источник объемной силы и как локальная неоднородность.

Рассчитаем энергию взаимодействия дырки с внешним упругим полем, используя методику, изложенную в [4]. Для этого найдем работу, производимую силами внутренних напряжений в эластической зоне при изменении вектора деформации $\vec{u}$ на величину $\delta\vec{u}$. Она по определению равна:

$$\delta A = \int_S \sigma_{ik}\delta u_k dS_i = \int_V \nabla_i\left(\sigma_{ik}\delta u_k\right)dV \quad (31)$$

Интегрирование в левой части производится по границе эластичной зоны S, а преобразование в интеграл по объему этой зоны V осуществляется с помощью теоремы Остроградского-Гаусса. Выполним в правой части преобразование, используя тождество:

$$\nabla_i\left(\sigma_{ik}\delta u_k\right) = \left(\nabla_i\sigma_{ik}\right)\delta u_k + \sigma_{ik}\nabla_i\delta u_k \quad (32)$$

Получаем

$$\delta A = \int_V \left(\nabla_i\sigma_{ik}\right)\delta u_k dV + \int_V \sigma_{ik}\nabla_i\delta u_k dV \quad (33)$$

Для вычисления первого интеграла используем уравнение равновесия упругой среды эластической зоны в виде:

$$\nabla_i\sigma_{ik} + f_k = 0 \quad (34)$$

и выражение для плотности объемной силы (26а). Получаем:

$$\int_V \left(\nabla_i\sigma_{ik}\right)\delta u_k dV = -\int_V f_k\delta u_k dV = \left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\rho_0(M)\delta V(M)\Omega_{kl}(M)\cdot\int_V \left(\nabla_l\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\right)\delta u_k dV \quad (35)$$

Для вычисления этого интеграла используем тождество

$$\left(\nabla_l\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\right)\delta u_k = \nabla_l\left(\delta u_k\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\right) - \left(\nabla_l\delta u_k\right)\delta(\vec{r}-\vec{r}_0), \quad (36)$$

затем интеграл разбиваем на два, первый из них преобразуем в интеграл по границе эластической зоны, и он оказывается равным нулю, т.к. дельта-функция в точках граничной поверхности равна нулю, используем также тождество:

$$\Omega_{kl}\nabla_l\delta u_k = \Omega_{lk}\delta\varepsilon_{lk} \quad (37)$$

В результате интеграл (35) оказывается равным

$$\int_V \left(\nabla_i\sigma_{ik}\right)\delta u_k dV = -\left(K + \frac{3}{4}G\right)\upsilon_0\delta n_0\Omega_{ik}(M)\delta\varepsilon_{ik}(M) \quad (38)$$

В этой формуле деформация ε_{ik} и вариация $\delta\varepsilon_{ik}$ берутся в точке нахождения дырки и относятся к внешнему полю, созданному внешними силами, не причастными к дырке.

Для вычисления второго интеграла в (33) воспользуемся равенством:

$$\sigma_{ik}\varepsilon_{ik} = \sigma_{ik}\nabla_i u_k \quad (39)$$

и перепишем его в виде:

$$\int_V \sigma_{ik}\nabla_i\delta u_k dV = \int_V \sigma_{ik}\delta\varepsilon_{ik}dV \quad (40)$$

Используем закон Гука:

$$\sigma_{ik} = C'_{ijklm}\varepsilon_{lm}, \quad (41)$$

где тензор модулей упругости C'_{ijklm} определен в формуле (29). Если упругая среда однородная, модули K и G не зависят от координат. Дырка создает локальную неоднородность упругих модулей, в результате чего модули K и G, а с ними и тензор упругости C_{ijklm} становятся зависящими от координат в соответствии с формулами (29), (30). Подставляя их в (41), а затем в интеграл (40), получаем:

$$\begin{aligned}\int_V \sigma_{ik}\delta\varepsilon_{ik}dV &= \int_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}dV + \vartheta\Delta C_{iklm}\int_V \varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)dV = \\ &= \int_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}dV + \vartheta\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}(\vec{r}_0)\delta\varepsilon_{ik}(\vec{r}_0)\end{aligned} \quad (42)$$

Подставив теперь интегралы (38) и (42) в формулу (33), получим

$$\delta A = -\left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\Omega_{ik}(M)\delta\varepsilon_{ik}(M) + \vartheta\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}(M)\delta\varepsilon_{ik}(M) + \int_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}dV \quad (43)$$

или, используя соотношение

$$C_{iklm}\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}\Delta C_{iklm}\delta\left(\varepsilon_{lm}\varepsilon_{ik}\right) \tag{44}$$

окончательно имеем

$$\delta A = \delta\left(\frac{1}{2}\int_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\varepsilon_{ik}dV - \left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\Omega_{ik}(M)\varepsilon_{ik}(M) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\vartheta(M)\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}(M)\varepsilon_{ik}(M)\right) \tag{45}$$

Если деформация происходит при постоянной температуре, то работа δA равна изменению свободной энергии эластической зоны $\delta A = -dF$. Поэтому свободная энергия эластической зоны с дыркой будет равна:

$$F = F_0(T) - \frac{1}{2}\int_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\varepsilon_{ik}dV + \left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\Omega_{ik}(M)\varepsilon_{ik}(M) -$$
$$- \frac{1}{2}\vartheta(M)\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}(M)\varepsilon_{ik}(M) \tag{46}$$

Здесь $F_0(T)$ – свободная энергия эластической зоны с дыркой в отсутствие внешнего поля. Второе слагаемое (объемный интеграл) равно энергии упругого поля эластической зоны без дырки. Следовательно, два последних слагаемых определяют энергию взаимодействия дырки с внешним упругим полем:

$$u_{вз} = \left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\Omega_{ik}(M)\varepsilon_{ik}(M) - \frac{1}{2}\vartheta(M)\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}(M)\varepsilon_{ik}(M) \tag{47}$$

Подставим сюда ΔC_{iklm} из формулы (30) и получим:

$$u_{вз} = \left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\Omega_{ik}(M)\varepsilon_{ik}(M) - \frac{1}{2}\vartheta(M)\left(\Delta K - \frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}^2(M) - \vartheta(M)\Delta G\varepsilon_{ij}^2(M) \tag{48}$$

Эта формула определяет энергию взаимодействия несимметричной дырки, находящейся в точке $M(\vec{r}_0)$ с внешним упругим полем. Воздействие упругого поля эластической зоны на дырку проявляется в том, что на нее действует сила, которая определяется как:

$$F = -\nabla u_{вз} \tag{49}$$

Дифференцируя (49), получаем:

$$F_j = -\left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\Omega_{ik}(M)\nabla_j\varepsilon_{ik}(M) + \vartheta(M)\left(\Delta K - \frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}(M)\nabla_j\varepsilon_{kk}(M) +$$
$$+ 2\vartheta(M)\Delta G\varepsilon_{ik}(M)\nabla_j\varepsilon_{ik}(M) \tag{50}$$

Для симметричной сферической дырки, когда $\Omega_{ik} = \delta_{ik}$, получаем:

$$\text{а)}\quad \Phi_{вз} = \left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\varepsilon_{kk}(M) - \frac{1}{2}\vartheta(M)\left(\Delta K - \frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}^2(M) - \vartheta(M)\Delta G\varepsilon_{ij}^2(M)$$
$$\text{б)}\quad F_j = -\left(K + \frac{4}{3}G\right)\upsilon_0\delta n_0(M)\nabla_j\varepsilon_{kk}(M) + \vartheta(M)\left(\Delta K - \frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}(M)\nabla_j\varepsilon_{kk}(M) +$$
$$+ 2\vartheta(M)\Delta G\varepsilon_{ik}(M)\nabla_j\varepsilon_{ik}(M) \tag{51}$$

Из этих формул видно, что сила, действующая на дырку, определяется пространственной неоднородностью внешнего деформационного поля. В [1] было показано, что в эластической зоне перед фронтом трещины устанавливается однородное напряженно-деформационное состояние сдвига. В таком поле сила, действующая на дырку, равна нулю. Следовательно, среда эластической зоны после установления в ней однородной равновесной вынужденной деформации не воздействует на дырку. Дырка испытывает действие только со стороны окружающих ее дырок.

Определим теперь энергию и силу парного

взаимодействия дырок. Это можно сделать, рассмотрев дырку в упругом поле другой дырки. Энергия взаимодействия первой дырки с полем второй и будет энергией взаимодействия дырок. Рассмотрим две дырки в точках M_1 и M_2. Ограничим рассмотрение случаем симметричных дырок, тогда все формулы сильно упрощаются. Энергия взаимодействия инвариантна относительно выбора системы координат. Поэтому для упрощения промежуточных преобразований поместим начало координат в дырку M_2, а ось абсцисс направим вдоль прямой, соединяющей дырки от точки M_2 к точке M_1. Две другие оси выбираем в плоскости, перпендикулярной этой оси. Расстояние между дырками обозначим, как R, тогда радиус вектор $\vec{R}$ будет иметь координаты $\vec{R}=(R,0,0)$ или $R_i = R\delta_{1i}$. Поле деформаций, созданное дыркой M_2 в точке M_1, найдем из формулы (22а)

$$\varepsilon_{ik}(M_1/M_2)=\frac{1}{4\pi}\upsilon_0\delta n_0(M_2)(\delta_{ik}-\delta_{1i}\delta_{1k})\frac{1}{R^3} \qquad (52)$$

Подставим это в формулу (51а) и после преобразований получим:

$$u_{вз}(M_1,M_2)=-\frac{3\upsilon_0^2}{8\pi^2}\vartheta(M_1)\Delta G(M_1)(\delta n_0(M_2))^2\frac{1}{R^6} \qquad (53)$$

Эта формула получена, исходя из того, что дырка M_1 находится в поле дырки M_2. Но обе дырки равноправны, поэтому можно рассмотреть дырку M_2 в поле дырки M_1. Тогда получим формулу, аналогичную вышеописанной, если только в ней переставить буквы M_1 и M_2. В этих двух формулах дырки представлены несимметрично – одна из них выступает как источник поля, а вторая как локальная неоднородность. Симметричная формула получится как их полусумма:

$$u_{вз}(M_1,M_2)=-\frac{3\upsilon_0^2}{16\pi^2}\left(\vartheta(M_1)\Delta G(M_1)(\delta n_0(M_2))^2+\vartheta(M_2)\Delta G(M_2)(\delta n_0(M_1))^2\right)\frac{1}{R^6} \qquad (54)$$

Здесь обе дырки представлены равноправно. Видно, что энергия взаимодействия дырок в эластической зоне обратно пропорционально шестой степени расстояния между ними.

Силу, действующую на дырку M_1 со стороны дырки M_2, найдем как:

$$\vec{F}_{M_1}=-grad_{M_1}u_{вз} \qquad (55)$$

или

$$F_{M_1}=-\frac{9\upsilon_0^2}{8\pi^2}\left(\vartheta(M_1)\Delta G(M_1)(\delta n_0(M_2))^2+\vartheta(M_2)\Delta G(M_2)(\delta n_0(M_1))^2\right)\frac{\vec{R}}{R^8} \qquad (56)$$

Сила, действующая на дырку M_2 со стороны дырки M_1, равна

$$\vec{F}_{M_2}=-\vec{F}_{M_1} \qquad (57)$$

Видно, что между дырками действует сила притяжения, которая тем больше, чем меньше расстояние между ними. Тепловое движение, придавая дыркам подвижность, может «помочь» силе притяжения сблизить дырки, в принципе, вплоть до их слияния.

Выше в этом параграфе мы установили, что собственное упругое поле дырки простирается на расстояние, не превышающее двух диаметров дырки. Это означает, что дырки начинают взаимодействовать (притягиваться друг к другу), когда расстояние между ними $R\le 2(a_1+a_2)$, где a_1 и a_2 – диаметры дырок. На больших расстояниях их можно считать невзаимодействующими. Размер дырки определяется мощностью слабого узла несущего каркаса, на месте которого она образовалась, т.е. величиной δn_0. При расстояниях между дырками, меньших вышеуказанного, упругие поля дырок начинают перекрываться, и чем больше степень перекрытия, тем больше сила притяжения дырок.

Если дырки имеют разные размеры, то упругое поле более мощной дырки имеет больший радиус действия. Маленькая дырка может оказаться целиком в поле большой. В то время как упругое поле маленькой дырки «не достает» до большой. Поэтому большая дырка может захватить маленькую или инициировать ее возникновение и удерживать силой притяжения. Поэтому около большой дырки образуется скопление («атмосфера») из маленьких дырок.

Определим напряжения в пространстве между дырками. Рассмотрим систему из двух дырок, схематически показанную на и рассчитаем напряжения на линии их соединения. Каждая из дырок создает собственное поле напряжений, определяемое формулой (25б). В выбранной системе координат тензор напряжений, создаваемых дыркой M_2, равен:

$$\sigma_{ik}^{M_2}=\frac{1}{2\pi}G\upsilon_0\delta n_0(M_2)(\delta_{ik}-3\delta_{1i}\delta_{1k})r^{-3} \qquad (58)$$

Аналогично, тензор напряжений, создаваемых дыркой M_1, равен:

$$\sigma_{ik}^{M_1} = \frac{1}{2\pi} G\upsilon_0 \delta n_0(M_1)(\delta_{ik} - 3\delta_{1i}\delta_{1k})(R-r)^{-3} \quad (59)$$

В пространстве между дырками упругие напряжения, создаваемые ими, аддитивно складываются. Поэтому напряжения на линии, соединяющей дырки, в некоторой точке $\boldsymbol{r}$ этой линии равны

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{2\pi} G\upsilon_0 \left(\delta n_0(M_1)(R-r)^{-3} + \delta n_0(M_2) r^{-3}\right)(\delta_{ik} - 3\delta_{1i}\delta_{1k}) \quad (60)$$

Распишем этот тензор покомпонентно:

$$\sigma_{11} = -\frac{1}{\pi} G\upsilon_0 \left(\delta n_0(M_1)(R-r)^{-3} + \delta n_0(M_2) r^{-3}\right) \quad \text{а)}$$

$$\sigma_{22} = \sigma_{33} = \frac{1}{2\pi} G\upsilon_0 \left(\delta n_0(M_1)(R-r)^{-3} + \delta n_0(M_2) r^{-3}\right) \quad \text{б)} \quad (61)$$

$$\sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0 \quad \text{в)}$$

Кстати, тот факт, что на линии, соединяющей дырки, тензор напряжений оказался диагональным, свидетельствует о том, что он приведен к главным осям, и выбранные направления координатных осей являются главными направлениями тензора. Как видно из первой из этих формул, нормальные напряжения σ_{11}, действующие вдоль линии, соединяющей дырки, отрицательны, т.е. являются напряжениями сжатия. Это понятно, т.к. между дырками действует сила притяжения и поэтому среда эластической зоны между ними испытывает в этом направлении сжатие. В поперечных направлениях, наоборот, действуют растягивающие напряжения. При уменьшении расстояния R между дырками все компоненты напряжения возрастают. Наоборот, при увеличении R напряжения быстро убывают, и когда дырки перестают взаимодействовать, напряжения между ними равны нулю.

Анализ формул (61) показывает, что поперечные растягивающие напряжения $\sigma_{22} = \sigma_{33}$ достигают наибольших значений на поверхности дырок, точнее на их экваторах и являются здесь касательными к поверхности дырок. Если дырки расположены на расстоянии, меньшем удвоенной суммы их диаметров, то их упругие поля перекрываются и, напряжение в пространстве между ними равно сумме парциальных напряжений. При этом, касательные напряжения на экваторах дырок возрастают, причем тем больше, чем ближе дырки друг к другу. Напряжения на линии, соединяющей дырки, также больше парциальных напряжений, но межу дырками есть «ямка» напряжений. В разные стороны от «ямки» напряжения повышаются. Положение «ямки» сдвинуто в сторону меньшей дырки тем больше, чем больше разница между дырками. Если одна дырка сильно превосходит другую по размерам и мощности, то хотя парциальные напряжения убывают с расстоянием по одинаковому закону $\approx r^{-3}$, но из-за превосходства одной дырки ее напряжения на одном и том же расстоянии r больше, чем напряжения малой дырки. Это приводит к тому, что касательные к экватору напряжения $\sigma_{22} = \sigma_{33}$ на поверхности маленькой дырки значительно возрастают, и тем больше, чем меньше расстояние между дырками и чем больше разнятся дырки. В частности, при достаточном сближении дырок, напряжение на поверхности малой дырки может превысить критическое (предел прочности на разрыв). Тогда возможно возникновение локального разрыва на поверхности малой дырки навстречу большой дырке. У маленькой дырки возникает острый «клювик», который становится концентратором напряжения (локальным усилителем напряжения) и стимулирует продвижение клюва-надрыва дальше. Если этот микроразрыв перейдет «ямку» напряжений, то попадет в область увеличивающихся поперечных растягивающих напряжений, которые стимулируют дальнейшее ускоряющееся продвижение микроразрыва с превращением его в микротрещину; все это заканчивается быстрым «проскакиванием» зародившегося микоразрыва в трещинку-канал, связывающий дырки. Происходит как бы пробой прослойки между дырками. Дырки почти в буквальном смысле оказываются «связанными одной веревочкой». Возможны и другие ситуации. Образовавшийся микроразрыв не развивается в трещинку-канал, или останавливается на полпути, не достигая второй дырки. Возможно образование микроразрыва между дырками с последующим развитием в канал или стабилизацией в виде чечевицеобразной субмикротрещины. Вся эта сложная картина регулируется соотношением между размерами и мощностью дырок и расстоянием между ними.

Таким образом, существует некоторое критическое сближение дырок, при котором между ними проскакивает трещинка-канал. Это критическое расстояние определяется соотношением размеров и мощностей дырок. В следующем параграфе мы постараемся ответить на вопрос, при каких условиях в ансамбле дырок некоторые из них оказываются связанными.

3. Фронт трещины, т.е. край ее клюва, как и изолированная дырка, является источником собственного упругого поля. Это поле нетрудно рассчитать, если представить себе фронт трещины как линию, вдоль которой непрерывно распределены элементарные источники поля – центры дилатации. Тогда тензор деформаций упругого поля фронта трещины запишется в виде:

$$\varepsilon_{ik} = \frac{\upsilon_0}{4\pi}\int_{-H}^{H}\left(\frac{\delta_{ik}}{r'^3} - 3\frac{x'_i x'_k}{r'^5}\right)h(z_0)dz_0 \qquad (62)$$

Здесь радиус-вектор $\vec{r}\,' = (x'_i)$ отнесен к локальной системе координат, связанной с каждой точкой фронта трещины. Для того, чтобы можно было произвести интегрирование, необходимо все записать в единой системе, привязанной к фронту. В этой формуле $h(z_0)$ – функция распределения центров дилатации на фронте трещины, так что $h(z_0)\Delta z_0$ – число таких центров на малом участке фронта Δz_0, а H – полудлина фронта. Расписывая покомпонентно тензор деформации, получаем:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{11} &= \frac{\upsilon_0}{4\pi}\int_{-H}^{H}\left(\frac{1}{r^3} - 3\frac{x^2}{r^5}\right)h(z_0)dz_0 \\
\varepsilon_{12} &= -\frac{3\upsilon_0}{4\pi}\int_{-H}^{H}\frac{xy}{r^5}h(z_0)dz_0 \\
\varepsilon_{13} &= -\frac{3\upsilon_0}{4\pi}\int_{-H}^{H}\frac{x(z-z_0)}{r^5}h(z_0)dz_0 \\
\varepsilon_{22} &= \frac{\upsilon_0}{4\pi}\int_{-H}^{H}\left(\frac{1}{r^3} - 3\frac{y^2}{r^5}\right)h(z_0)dz_0 \qquad (63) \\
\varepsilon_{23} &= -\frac{3\upsilon_0}{4\pi}\int_{-H}^{H}\frac{y(z-z_0)}{r^5}h(z_0)dz_0 \\
\varepsilon_{33} &= \frac{\upsilon_0}{4\pi}\int_{-H}^{H}\left(\frac{1}{r^3} - \frac{3(z-z_0)^2}{r^5}\right)h(z_0)dz_0
\end{aligned}$$

Примем для простоты равномерное распределение центров дилатации по фронту трещины: $h(z_0) = 1/2H$. Тогда вычисляя интегралы, получим:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{11} &= -\varepsilon_{22} = -\frac{\upsilon_0}{4\pi H}\frac{x^2 - y^2}{\rho^4} \\
\varepsilon_{12} &= -\frac{\upsilon_0}{4\pi H}\frac{xy}{\rho^4} \qquad (64) \\
\varepsilon_{12} &= \varepsilon_{23} = \varepsilon_{33} = 0
\end{aligned}$$

Здесь $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ – расстояние точки наблюдения до фронта трещины. Из этих формул видно, что полученный тензор деформаций не зависит от координаты z вдоль фронта, т. е. собственное упругое поле фронта трещины обладает трансляционной симметрией вдоль фронта. Удобнее формулы (14) записать в полярных координатах в пл. (x, y). Получаем:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{11} &= -\varepsilon_{22} = -\frac{\upsilon_0}{4\pi H}\frac{\cos 2\varphi}{\rho^2} \\
\varepsilon_{12} &= -\frac{\upsilon_0}{8\pi H}\frac{\sin 2\varphi}{\rho^2} \qquad (65) \\
\varepsilon_{13} &= \varepsilon_{23} = \varepsilon_{33} = 0
\end{aligned}$$

Легко видеть, что след этого тензора деформаций равен нулю, т. е. упругое поле фронта трещины чисто сдвиговое. Это поле обратно пропорционально квадрату расстояния от фронта, в то время как поле изолированной дырки убывает $\approx r^{-3}$, т.е. поле фронта трещины простирается на значительно большие расстояния.

Теперь нетрудно найти энергию взаимодействия дырки, попавшей в поле фронта трещины с этим полем, а также силу, действующую на дырку в этом поле. Для этого воспользуемся формулами (51), подставив туда тензор деформаций (65)

$$\begin{aligned}
u_{вз} &= -\frac{\vartheta\Delta|G\upsilon_0^2}{32\pi^2 H^2}\frac{1}{\rho^4}\left(4\cos^2 2\phi + \sin^2 2\phi\right) \quad \text{а)} \\
F_x &= -\frac{\vartheta\Delta G\upsilon_0^2}{8\pi^2 H^2}\frac{\cos\phi}{\rho^5} \qquad (66) \\
F_y &= -\frac{\vartheta\Delta G\upsilon_0^2}{8\pi^2 H^2}\frac{\sin\phi}{\rho^5}; \quad F_z = 0 \quad \text{б)}
\end{aligned}$$

Из этих формул следует, что в упругом поле фронта трещины на дырку действует сила притяжения, т. е. дырка, зародившееся в этом поле или попавшая в него в процессе своего перемещения не покидает этого поля. Таким образом, упругое взаимодействие дырки с фронтом трещины приводит к образованию «облака» дырок вблизи фронта.

4. От рассмотрения отдельных дырок перейдем к рассмотрению их коллективного поведения. В реальной эластической зоне число дырок может быть значительным, поэтому оправданно их усредненное описание. Дырки – это результат флуктуаций теплового движения на слабых местах эластической зоны (в слабых узлах несущего каркаса). Дырка – стабильное, долгоживущее образование, время ее существования определяется ее размерами. Мелкие дырки могут залечиваться, в то время, как крупные, раз возникнув, не исчезают. С течением времени количество дырок увеличивается до некоторого критического уровня, когда наступает коллапс эластической зоны и она теряет устойчивость. В объеме эластической зоны дырки распределяются очень неравномерно, а именно, как мы показали выше, они группируются в скопления около крупных дырок и около фронта трещины. Дырки, будучи порождением теплового движения, сами участвуют в этом движении, обладая некоторой подвижностью. Тепловое движение дырок в отсутствие внешнего поля состоит в чередовании беспорядочных колебаний около временного положения равновесия и редких перескоков из одного подобного положения в соседнее. Поступательное перемещение дырки подобно движению тяжелой броуновской частицы под влиянием случайных воздействий окружающих ее атомов эластической зоны. Подвижность дырок невелика и их поступательное броуновское движение медленное и тем медленнее, чем больше размеры дырки. Во внешнем поле тепловое движение приобретает систематическую составляющую, и возникают диффузионные потоки дырок. А именно, как мы уже видели, мелкие дырки, попавшие в сферу влияния большой дырки, под действием силы притяжения сближаются с ней, в некоторых случаях вплоть до связывания или даже полного слияния. Аналогичная картина и вблизи фронта трещины. Таким образом, на развитой стадии дыркообразования в эластической зоне возникает множество разнонаправленных диффузионных потоков дырок.

В [1] установлено, что по окончании формирования эластической зоны, т. е. по завершении вынужденной высокоэластической ползучести, в ней устанавливается однородное напряженно-деформированное состояние с напряжением, равным пределу вынужденной эластичности, и с постоянной деформацией. На фоне этого однородного состояния возникают местные, локальные возмущения, создаваемые появившимися дырками. Как было показано, сфера влияния дырки имеет радиус не более двух ее диаметров, т. е. возмущение локализуется вблизи дырки. Пока дырок мало, возмущенные участки разбросаны беспорядочными «пятнами» в объеме эластической зоны, не перекрываясь друг с другом. По мере накопления дырок и их объединения в скопления, число и размеры таких «пятен» увеличиваются, и перед коллапсом эластическая зона вся покрывается «пятнами» упругого возмущения, и напряженно-деформированное состояние зоны становится очень сложным.

В системах с переменным числом частиц появляется специфический термодинамический параметр – химический потенциал. По своему смыслу химический потенциал – это свободная энергия Гиббса в расчете на одну частицу. Систему дырок в эластической зоне можно рассматривать как твердый раствор, в котором дырки являются «частицами» растворенного вещества. Состояние такого раствора определяется концентрацией растворенного вещества, т. е. в данном случае числом дырок в единице объема. В работе [2] была введена функция $\Phi(t)$, определяющая относительное число дырок в объеме эластической зоны по отношению к полному числу слабых узлов $p(V_0)$ в произвольный момент t, а произведение $p(V_0)\Phi(t)$ определяет текущее количество дырок в зоне. Функция $\Phi(t)$ – это интегральная характеристика, она не учитывает неоднородность распределения дырок в объеме эластической зоны. Поэтому введем концентрацию дырок $n(M,t)$. Величина $n(M,t)\Delta V$ определяет количество дырок в малом объеме ΔV эластической зоны в произвольный момент. Концентрация $n(M,t)$ меняется в пространстве и во времени. Интеграл по объему эластической зоны определяет полное число дырок в зоне:

$$\int n(M,t)dV = p(V_0)\Phi(t) \tag{67}$$

Эта формула связывает локальную концентрацию дырок с их интегральной концентрацией. Тот факт, что вокруг больших дырок скапливаются меньшие, свидетельствует, что дырки распределены в объеме эластической зоны очень неравномерно. Их локальная концентрация $n(M,t)$ сильно меняется в пространстве и во времени, образуя сгустки и разрежения.

На раннем этапе дыркообразования, когда их мало, и они не взаимодействуют друг с другом, для химического потенциала можно использовать приближение слабого раствора. В этом приближении химический потенциал системы дырок записывается следующим образом

$$\mu_0(n,T) = KT\ln n + \psi(T) \tag{68}$$

где $\psi(T)$ – функция только температуры. Через концентрацию n он зависит от пространственных координат и времени. Но в деформированной эластической зоне появляется дополнительная энергия дырки, играющая роль потенциальной энергии частицы во внешнем поле. Энергию взаимодействия дырки с полем эластической зоны получим, если в формулу (51) подставим тензор деформаций зоны $\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{12} = const$. В результате химический потенциал системы дырок будет:

$$\mu = \mu_0 + u_{вз} \quad \text{а)}$$
$$\mu = KT\ln n + \psi(T) - \vartheta\Delta G\varepsilon_{12}^2 \quad \text{б)} \tag{69}$$

Применим к обеим частям этой формулы операцию пространственного градиента ∇:

$$\nabla\mu = \nabla\mu_0 + \nabla u_{вз} \tag{70}$$

Второе слагаемое здесь с точностью до знака – это сила, действующая на дырку со стороны поля эластической зоны. Поскольку деформационное состояние зоны однородно, то $\nabla u_{вз} = 0$. Это означает, что однородное поле эластической зоны никак не воздействует на дырки. Первое слагаемое $\nabla\mu_0$ – это тоже сила (с точностью до знака). Это специфическая сила, которая действует на частицы растворенного вещества со стороны частиц растворителя в процессе их теплового движения, и называется диффузионной силой. В нашем случае – это сила, действующая на дырки со стороны теплового движения атомов среды, их окружающей, т.е. это некоторая средняя сила, определяемая «толчками» атомов «растворителя» и определяющая броуновское движение дырки. Диффузионная сила проявляется в растворе как осмотическое давление, которое пропорционально температуре и описывается законом Вант-Гоффа [6].

Равновесие дырок по отношению к их диффузионному перемещению определяется условием независимости химического потенциала μ от пространственных координат (однородность химического потенциала). В этом случае $\nabla\mu = 0$, тогда из формулы (70) следует, что наряду со вторым слагаемым $\nabla u_{вз}$, равно нулю и первое слагаемое $\nabla\mu_0$, т. е. диффузионная сила тоже отсутствует. Из этого следует, что $\nabla\mu = 0$, т. е. как это видно из формулы (70) химический потенциал дырок не зависит от пространственных координат. Это означает, что дырки распределены в объеме эластической зоны в среднем равномерно. В тоже время число дырок растет со временем. Из всего этого следует, что начальный этап дыркообразования происходит равновесно по отношению к пространственному распределению дырок с сохранением пространственной однородности.

Рассмотрим теперь поведение мелких дырок в поле большой дырки. Большая дырка создает вокруг себя упругое поле, которое описывается формулами (22). Энергия взаимодействия дырки с этим полем опять получается из формулы (51), но только в нее нужно подставить теперь тензор деформаций из формулы (22).

Имеем

$$u_{вз} = -\frac{3}{8\pi^2}\vartheta\Delta G\upsilon_0^2(\delta n_0)^2\frac{1}{r^6} \tag{71}$$

Здесь r – расстояние от центра большой дырки, куда помещено начало координат, до точки нахождения мелкой дырки. Сила, действующая на малую дырку в этом поле, равна:

$$\vec{F} = -\nabla u_{вз} = -\frac{3}{8\pi^2}\vartheta\Delta G\upsilon_0^2(\delta n_0)^2\frac{\vec{r}}{r^8} \tag{72}$$

Видно, что это сила притяжения. Таким образом, около большой дырки будет скапливаться «облако» мелких дырок.

Мелкие дырки имеют очень незначительный радиус влияния и потому их можно считать невзаимодействующими, даже если их достаточно много. Тогда такую систему дырок можно опять рассматривать в приближении слабого твердого раствора. Химический потенциал облака малых дырок будет равным:

$$\mu(n,T,r) = KT\ln n + \frac{\alpha}{r^6} + \psi(T) \tag{73}$$

где для краткости обозначено:

$$\alpha = \frac{3}{8\pi^2}\vartheta\Delta G\upsilon_0^2(\delta n_0) \tag{74}$$

Равновесие «облака» мелких дырок определяется условием $\mu(r) = const$. Тогда из (73) получаем равновесную плотность дырок в «облаке»

$$n(r) = n_0(T)e^{\frac{\alpha}{KT}r^{-6}} \tag{75}$$

Следовательно, большая дырка, вовлекая в сферу своего влияния мелкие дырки, а, также инициируя их дополнительное зарождение, создает округ себя некую «атмосферу», в которой с течением времени устанавливается равновесное распределение плотности, и которая по мере удаления от центра притяжения становится все более «разреженной» в соответствии с формулой (6.6.75). Аналогичная «атмосфера» устанавливается и вблизи фронта трещины, только ее плотность убывает с расстоянием медленнее.

Общий вывод можно сделать такой. Каждая дырка окружена своей «атмосферой» из более мелких дырок. Плотность такой «атмосферы» и ее протяженность определяются мощностью притягивающего центра, т. е. в первую очередь его размерами.

Если равновесие в «атмосфере» мелких дырок еще не установилось, то отличие от него характеризуется градиентом химического потенциала $\nabla\mu = \nabla\mu_0 + \nabla u_{вз}$. Этот градиент вызывает диффузионный поток мелких дырок к большим, он пропорционален величине градиента $\nabla\mu$, т. е. средней силе, действующей на дырку – сумме диффузионной и внешней сил и направлен противоположно $\nabla\mu$, т.е. в сторону результирующей силы. В равновесии, когда $\nabla\mu = 0$, эти силы, будучи направлены в разные стороны, уравновешивают друг друга.

Диффузионный поток определяется формулой:

$$\vec{J} = n\vec{V} = -\gamma\nabla\left(\mu_0 + u_{вз}\right) \qquad (76)$$

Здесь $\vec{V}$ – скорость поступательного перемещения мелких дырок. Видно, что поток состоит из двух частей: диффузионного броуновского потока:

$$\vec{J}_1 = -\gamma\nabla\mu_0 \qquad а)$$

и вынужденного: (77)

$$\vec{J}_2 = -\gamma\nabla u_{вз} \qquad б)$$

Поэтому и скорость дырок $\vec{V}$ разбивается на две скорости $\vec{V}_1$ и $\vec{V}_2$. Диффузионный поток равен:

$$\vec{J}_1 = n\vec{V}_1 = -\gamma\nabla\mu_0 = -\gamma\frac{\partial\mu_0}{\partial n}\nabla n = -D\nabla n \qquad (78)$$

где коэффициент диффузии $\boldsymbol{D}$ определяется соотношением:

$$D = \gamma\frac{\partial\mu_0}{\partial n} = \gamma\frac{KT}{n} \qquad (79)$$

Здесь использована формула (68).

Вынужденный поток будет:

$$\vec{J}_2 = n\vec{V}_2 = -\gamma\nabla u_{вз} = \gamma\vec{F} = -2a\gamma\frac{\vec{r}}{r^8} \qquad (80)$$

Здесь использована формула (72) для силы, действующей на мелкую дырку в поле большой. Отсюда получается, что вынужденная скорость $\vec{V}_2$ равна:

$$\vec{V}_2 = \frac{\gamma}{n}\vec{F} = -\frac{\gamma}{n}\nabla u_{вз} = -в\,u_{вз} \qquad (81)$$

где константа:

$$в = \frac{\gamma}{n} \qquad (82)$$

называется вынужденной подвижностью дырки. Результирующий поток дырок равен

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 = -D\nabla n - 2a\gamma\frac{\vec{r}}{r^8} = -D\nabla n + \gamma\vec{F} \qquad (83)$$

Как видно из формул (78, 80), потоки $\vec{J}$ и $\vec{J}_2$, а также скорости $\vec{V}_1$ и $\vec{V}_2$ направлены в противоположные стороны. Диффузионный поток $\vec{J}_1$ направлен противоположно градиенту химического потенциала, т.е. в сторону убывания концентрации дырок от притягивающего центра, а вынужденный поток $\vec{J}_2$ направлен, наоборот, к этому центру. Поскольку около большой дырки идет накапливание мелких дырок, то до достижения равновесия перешивает вынужденный поток, и результирующая скорость дырок направлена к притягивающему центру. По достижении равновесия эти два потока уравновешивают друг друга, поступательное перемещение дырок прекращается и в создавшейся «атмосфере» мелкие дырки совершают только колебания около положений равновесия и редкие беспорядочные перескоки.

Сравнив выражения для коэффициента диффузии и подвижности, получим

$$D = в\,KT \qquad (84)$$

Это аналог известной в теории броуновского движения формулы Эйнштейна, связывающей два кинетических коэффициента – коэффициент диффузии и подвижность дырок.

Величина, обратная подвижности называется коэффициентом внутреннего трения

$$k = \frac{1}{в} = \frac{KT}{D} \qquad (85)$$

Пространственное и временное распределение дырок в неравновесной «атмосфере» описывается уравнением неразрывности

$$\frac{\partial n}{\partial t} + div\,\vec{J} = g\left(\vec{r}, t\right) \qquad (86)$$

где $g\left(\vec{r}, t\right)$ – функция источника дырок. Смысл ее состоит в том, что величина $g\left(\vec{r}, t\right)\Delta V\Delta t$ определяет количество дырок, зародившихся в малом объеме ΔV за малое время Δt. Интегрируя ее по объему эластической зоны, получим число дырок, зародившихся в зоне за время Δt:

$$\int g\left(\vec{r}, t\right)dV = p\left(V_0\right)\phi\left(t\right)\Delta t \qquad (87)$$

где функция $\phi\left(t\right)$ определена в работе [2]. Интегрируя еще раз, теперь по времени, получим полное число дырок во всей эластической зоне в момент t:

$$\int_0^t\int g\left(\vec{r}, t\right)dV\,dt = p\left(V_0\right)\Phi\left(t\right) \qquad (88)$$

Подставляя в уравнение (86) поток $\vec{J}$ из формулы (83), получаем после преобразований:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n - n\frac{10\alpha D}{KT}r^{-8} + g\left(\vec{r}, t\right) \qquad (89)$$

Это обычное уравнение конвективной диффузии с источниками. Оно описывает процесс установления равновесия в «атмосфере» крупной дырки, т.е. процесс формирования этой «атмосферы».

Итак, около каждой дырки имеется своя «атмосфера» из более мелких дырок различной плотности и протяженности. В целом, в эластической зоне устанавливается некая иерархия: дырка со своей «атмосферой» входит в состав «атмосферы» еще более крупной дырки, эта система является частью еще большей системы и т.д.

Подведем итог. Мы описали зарождение дырок в эластической зоне, их упругие поля, их взаимодействие, связывание и слияние дырок, описали кинетику начального периода дыркообразования и кинетику этого процесса на развитой стадии и процесс образования скоплений дырок. Осталось рассмотреть заключительный этап эволюции зоны, заканчивающийся ее коллапсом. Ключевым здесь является вопрос о том, какова критическая концентрация дырок, т.е. в какой момент наступает коллапс. Но для этого нам потребуется другой подход.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Валишин А.А., Мищенко Д.В. Особенности квазихрупкого разрушения полимеров и композитов на их основе // Вестник МИТХТ. 2010. Т. 5. № 6. С. 99–104.
2. Валишин А.А., Степанова Т.С. Накопление локальных повреждений в зоне вынужденной эластичности перед фронтом трещины разрушения в полимерах // Вестник МИТХТ. 2012. Т. 7. № 6. С. 92–103.
3. Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. – М.: Мир, 1985. 302 с.
4. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. – М.: Наука, 1972. 203 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц И.М. Теория упругости. – М.: Наука, 1978. 358 с.
6. Гуревич Л.Э. Основы физической кинетики. – Л.-М.: ГИТТЛ, 1940. С. 14.

THE ELASTIC INTERACTION OF LOCAL DEFECTS AT QUASIBRITTLE FRACTURE OF POLYMERS AND COMPOSITES BASED ON THEM

A.A. Valishin[@], T.S. Mironova

M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies, Moscow, 119571 Russia

[@]*Corresponding author e-mail: nas.webwork@gmail.com*

The article describes the mechanism of the elastic interaction of local micro-defects called holes, which are formed and accumulate in the forced elasticity area in front of the fracture crack in polymers. Amorphous glassy polymers such as PMMA are considered. The elastic field of the holes, their own elastic energy, the interaction energy of the holes and the strength of their two-body interaction are calculated. The interaction of holes leads to the fact that each hole is surrounded by an "atmosphere" of smaller holes. It is shown that the fracture crack is the source of its own elastic field. It is shown that the holes diffuse toward the front of the crack. The diffusive flux of the holes was calculated.

Key words: *micro-defects called holes, elastic holes fields, holes diffusion.*