

ДЕЯКІ ФЕНОМЕНОЛОГІЧНІ ПІДХОДИ ДО ОПИСУ УТВОРЕННЯ МІКРОТРИЩИН У ЛАВОПОДІБНИХ ПАЛИВОВІСНИХ МАТЕРІАЛАХ

В. В. Ігнатюк, Т. М. Верхоляк

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

Шляхом теоретичного моделювання отримано вирази для часів нуклеації та росту мікротріщин усередині лавоподібних паливовісних матеріалів. Проведено оцінки відповідних енергій активації. Показано, що врахування геометрії тріщини, міжатомної взаємодії між її краями та термоактивованої дифузії частинок веде до зменшення критичних значень напружень, при яких настає миттєве руйнування матеріалу.

Вступ

Дослідження радіаційного дефектоутворення в лавоподібних паливовісних матеріалах (ЛПВМ) є надзвичайно актуальними з точки зору заходів, що мають передувати роботам по перетворенню об'єкта “Укриття” на екологічно безпечний об'єкт [1], оскільки допомагають вирішити питання про міцнісні характеристики конструкційних матеріалів об'єкта “Укриття”. З експериментальних спостережень відомо [2], що формування тріщин як у пластичних, так і крихких матеріалах відбувається за подібним сценарієм: зародження, ріст та коалесценція пустот субмікронного розміру. Відмінність полягає лише в різній довжині новоутворених зародків тріщин: у тілах типу кераміки вони становлять біля 10 нм, що на три порядки менше, ніж у металах і сплавах. Можна з впевненістю стверджувати, що зародження таких нанопустот відбувається в областях пониженої концентрації, прикладом яких можуть бути розупорядковані області всередині латентних треків [3]. У процесі опромінення в розупорядкованих областях будуть виникати локальні зміни об'єму, причому оточуючий матеріал буде перешкоджати таким об'ємним змінам, що спричинятиме виникнення помітних механічних напружень у матрицях ЛПВМ. Таким чином, радіаційно-пошкоджені області всередині ЛПВМ стають акумуляторами внутрішніх напружень, що поширюються попереду вже сформованої мікротріщини (МТ) певної початкової довжини l_{min} , і ведуть до швидкого збільшення розмірів останньої при наближенні l до критичної межі. І хоча негайного руйнування ЛПВМ не відбудеться внаслідок малого розміру розупорядкованих областей і подальшої релаксації напружень унаслідок послаблення внутріатомних зв'язків, можливий механізм “сповільненої” деградації матеріалу, який пов'язаний з термоактивацією внутрішніх напружень [4 - 6] та гетерогенною структурою ЛПВМ.

У даній роботі ми зосередимо свою увагу на аналізі кількох так званих гібридних моделей [7] для опису тріщиноутворення всередині фрагментів ЛПВМ. Спочатку ми розглянемо та проаналізуємо модель Гріффітса [8] для двовимірної МТ, що виникає в напрямку, перпендикулярному до прикладеного розтягуючого зусилля. Далі ця модель буде модифікована за рахунок дії міжмолекулярних сил, що враховують взаємодію між краями МТ [9 - 11] в її вершинній зоні. Після того буде враховано термоактиваційні процеси поверхневої дифузії частинок в околі МТ. Для цієї моделі будуть розраховані енергії активації, що визначають часи нуклеації та росту МТ. У кінці роботи будуть зроблені висновки щодо ефективності та вірогідності застосування тих чи інших моделей.

Аналіз найпростіших моделей формування МТ усередині ЛПВМ та зміни їх механічних властивостей під дією самоопромінення

Модель Гріффітса

У рамках мезоскопічного підходу до опису дефектів основним механізмом формування МТ вважається термоактивація флуктуацій внутрішніх напружень. Згідно з гіпотезою Гріффітса [8] для моделі двовимірної МТ, що виникає в напрямку, перпендикулярному до

прикладеного розтягуючого зусилля, можна записати вираз для вільної енергії на одиницю довжини тріщини

$$U(\sigma, l) = \gamma l - \frac{l^2 \sigma^2}{2E}, \quad (1)$$

де перший член відповідає енергії, яку потрібно затратити для створення МТ довжини l , а другий описує вивільнення енергії в пружному середовищі при виникненні МТ. Решта величин у рівнянні (1) мають такий зміст: E – модуль Юнга, σ – внутрішнє напруження в околі МТ, γ – енергія, яку необхідно затратити для збільшення площі поверхні МТ на одиницю; з достатньою точністю її можна апроксимувати виразом $\gamma = Ea$, де a означає міжатомну відстань.

Максимум енергії (1) визначає критичний розмір МТ

$$l_{кр} = \frac{\gamma E}{\sigma^2} = a \frac{E^2}{\sigma^2}, \quad (2)$$

при якому починається швидке руйнування матеріалу. З іншого боку, зменшення початкових розмірів веде до зменшення $U(\sigma, l)$, тому зникнення початкових дефектів також є енергетично вигідним. Під терміном “початкові дефекти” будемо вважати наявність у матриці ЛПВМ певної кількості МТ із характерними розмірами $l_{мін} \ll l_{кр}$. Не вдаючись у деталі визначення $l_{мін}$ в окремій моделі деградації ЛПВМ (детальніше про перебіг процесів, що лежать в основі таких моделей, ідеться в роботі [10]), далі буде подано більш формальне означення $l_{мін}$.

Швидкість розвинення МТ визначається законом Арреніуса

$$\tau^{-1} \propto \text{Exp}[-E_{кр} / (k_B T)], \quad (3)$$

де енергія активації $E_{кр}$ визначається величиною вільної енергії при досягненні МТ критичної довжини $l_{кр}$ і у двовимірному випадку дорівнює

$$E_{кр} \equiv F(\sigma, l_{кр}) = \gamma^2 E / (2\sigma^2) = a^2 E / 2 (1/\varepsilon)^2. \quad (4)$$

Для тривимірної тріщини замість енергії активації на одиницю довжини, що описується співвідношенням (4), слід робити заміну $E_{кр} \rightarrow l_z E_{кр}$. У випадку квазітривимірної МТ l_z означає протяжність тріщини вздовж осі Oz , яка перпендикулярна як напрямку розтягуючої сили, так і напрямку поширення МТ. Для оцінки енергії активації знизу можна покласти $l_z \propto a$. Надалі ми оперуватимемо означеннями для енергії на одиницю довжини МТ, що відповідає 2D-випадку.

Зауважимо, що модель Гріффітса є досить спрощеною. У першу чергу вона не враховує дискретність (атомістичну природу) матеріалу, що зазнає руйнування. Відомо, що в околі критичних напружень є область метастабільних станів (“область захоплення” [7]): для переходу з одного стану в інший потрібно затратити деяку енергію, хоча й значно меншу від критичного значення (4). Крім того, нелінійність взаємодії між краями тріщини приводить до того, що руйнування МТ починається не миттєво при досягненні величини $l_{кр}$, а з певним запізненням. Як висота активаційних бар’єрів метастабільних станів, так і глибина енергетичних ям зменшується при відхиленні довжини МТ від критичного значення $l_{кр}$, тобто при віддаленості від зони захоплення. Іншим недоліком моделі Гріффітса є нехтування міжатомною взаємодією між краями тріщини, що не дає змоги ефективно моделювати перебіг цілого ряду процесів, що можуть відбуватись усередині матриць ЛПВМ.

Модель, що враховує міжатомну взаємодію між краями тріщини

Згідно з моделлю Френкеля [9] будемо розглядати МТ як дві з’єднані пластини, що розтягуються зовнішньою силою, і між якими існує молекулярне притягання. Молекулярне притягання між поверхнями виберемо у формі

$$f(y(x)) = \frac{E}{a} y(x) \exp\left[-\frac{y(x)}{a}\right], \quad (5)$$

де $y(x)$ – відстань між поверхнями тріщини в точці x . Слід підкреслити, що однозначних критеріїв у виборі профілю та форми сили $f(y(x))$ не існує. Очевидно, що ця сила повинна відрізнятись від нуля лише у вузькій області поблизу краю МТ.

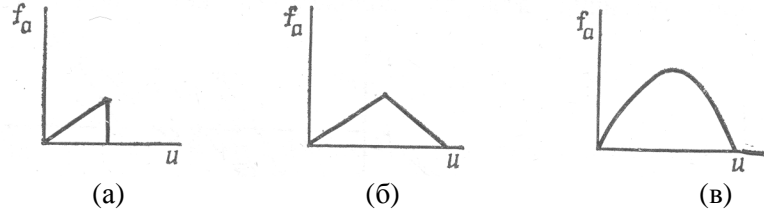


Рис. 1. Приклади міжатомних сил у вершині тріщини в залежності від розкриття u .

Хоча її моделюють як розривну (рис. 1а) та кусково-неперервну функції (рис. 1б), фізична поверхнева сила має бути гладкою (хоча й нелінійною) функцією від відстані, як це зображено на рис. 1в. Наш вибір сили взаємодії країв МТ у вигляді рівняння (5) відповідає реалізації останнього критерію.

Енергія розведення поверхонь тріщини на відстань y виражається як

$$\gamma(y) = \int_0^y f(y') dy' = Ea[1 - (y/a + 1) \exp[-y/a]]. \quad (6)$$

Зрозуміло, що $\gamma(\infty) = Ea$. Як показують експериментальні вимірювання [7], поверхнева енергія квазітривимірної тріщини дійсно визначається таким співвідношенням та лежить у діапазоні кількох електрон-вольтів. Повна сила, яка діє на елемент поверхні МТ, визначається як $\sigma - f(y(x))$, де σ – однорідне зовнішнє напруження, прикладене до поверхні однієї пластини. Очевидно, ми можемо розглядати й іншу геометрію зовнішніх напружень. Зокрема, у роботі [11] було розглянуто деформацію матеріалу внаслідок дії лінійної сили. Без втрати загальності можна також задавати певну просторову залежність напружень $\sigma(x)$.

У теоріях, що пов'язані зі статикою деформованої ґратки [7, 9], для визначення профілю МТ розв'язувалось рівняння суцільного середовища. Співвідношення для форми тріщини задавалось відповідним рівнянням для слабозігнутого стержня шириною c , який деформується під впливом зовнішньої сили (див., наприклад, [12]):

$$EI \frac{d^4 y}{dx^4} + cf(y(x)) - c\sigma = 0. \quad (7)$$

У нашому випадку прямокутного стержня з висотою b і шириною c його момент інерції $I = b^3 c / 12$, або $I' = I / c = b^3 / 12$. На кінцях тріщини поверхні плавно сходяться, що проявляється в таких граничних умовах:

$$y(-l) = y(l) = \frac{dy(-l)}{dl} = \frac{dy(l)}{dl} = 0.$$

У загальному випадку рівняння (7) є нелінійним і його точний розв'язок невідомий. Тому ми розглядатимемо випадок слабкої міжмолекулярної взаємодії ($f(y) \ll \sigma$) і припускаємо, що вона мало впливає на форму тріщини. Тоді розв'язок рівняння (7) набирає вигляду [12]

$$\tilde{y}(\tilde{x}) = \frac{\varepsilon(\tilde{x}^2 - \tilde{l}^2)^2}{24\tilde{I}}, \quad (8)$$

де $\varepsilon = \sigma E$, а всі інші величини наведено в одиницях сталої ґратки: $\tilde{y} = y/a$, $\tilde{x} = x/a$, $\tilde{I} = I/a^3 = \tilde{b}^3/12$. Розв'язок (8) описує тріщину з максимальним розкриттям $\tilde{y}(0) = \varepsilon \tilde{I}^4 / (24\tilde{I})$. Енергію, яка вивільняється при утворенні тріщини, асоціюємо з пружною енергією модельного плоского перерізу

$$U_1 = -\frac{1}{2} \sigma \int_{-l}^l dx y(x) = -\frac{\varepsilon^2 a^2 E \tilde{I}^5}{45\tilde{I}}. \quad (9)$$

Енергію міжмолекулярної взаємодії між краями МТ можна представити як

$$U_2(l) = \int_{-l}^l dx \gamma(y(x)), \quad (10)$$

У результаті при великих довжинах МТ енергія взаємодії визначається як

$$U_2(l) \approx 2Ea^2 \left[\tilde{l} - \frac{3\sqrt{\pi}}{8\tilde{l}} \sqrt{\frac{24\tilde{I}}{\varepsilon}} \right]. \quad (11)$$

Рівняння (11) має фундаментальне значення. Перший член цього виразу пов'язаний з $\gamma(\infty)$, що визначається як енергія повністю розкритої МТ, другий характеризує зміни поверхневої енергії внаслідок взаємодії між краями МТ. У протилежному випадку малих \tilde{l} отримуємо

$$U_2(\tilde{l}) \approx 2Ea^2 \left(\frac{64}{315} \left(\frac{\varepsilon}{24\tilde{I}} \right)^2 \tilde{l}^9 - \frac{1024}{9009} \left(\frac{\varepsilon}{24\tilde{I}} \right)^3 \tilde{l}^{13} \right), \quad (12)$$

що визначає нелінійну поведінку U_2 .

Як числові оцінки залежності повної енергії тріщини $U = U_1 + U_2$ від її довжини l (рис. 2), так і аналітичні розклади U вказують на існування мінімуму при невеликих значеннях l та максимуму при певній критичній довжині $l_{кр}$, коли тріщина стає нестійкою. На відміну від результатів теорії Гріффітса причиною появи стійкого мінімуму на енергетичній кривій є міжмолекулярна взаємодія між краями МТ в її вершинній зоні.

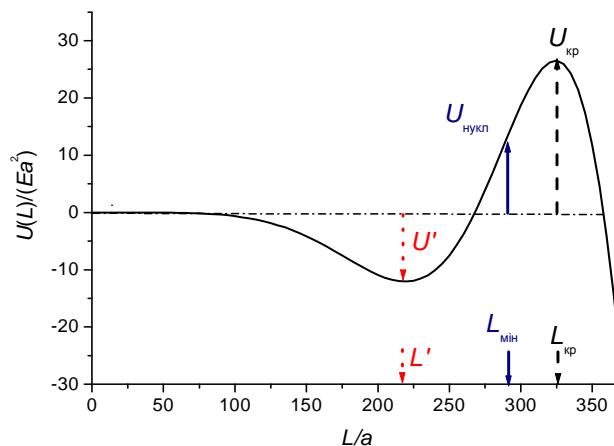


Рис. 2. Залежність енергії МТ від її довжини.

Стрілками позначено значення \tilde{l}' (14), \tilde{l}_{\min} (15), $\tilde{l}_{кр}$ (17) та відповідні висоти енергетичних бар'єрів (глибини ям).

Означимо певну область поблизу краю МТ – її *вершинну зону* [4 - 5, 11] – як відстань від краю тріщини $s(l)$, при якій розкриття МТ дорівнює міжатомній відстані $y(l - s(l)) = a$. Для протяжності вершинної зони $s(l)$ можна записати таке співвідношення:

$$\tilde{s}(\tilde{l}) \approx \frac{1}{2\tilde{l}} \sqrt{\frac{24\tilde{I}}{\varepsilon}}. \quad (13)$$

Скориставшись результатами для малих довжин тріщин (12), можна показати, що енергія стає мінімальною при

$$\tilde{l}' = \left(\frac{35\tilde{I}}{2} + \frac{6125\tilde{I}\varepsilon}{297} \right)^{1/4}. \quad (14)$$

З рівняння (14) випливає, що навіть при малих деформаціях ε енергетично вигідно формування зародкових МТ. При значеннях $b \ll 10^3$ довжина \tilde{l}' сягає кількох сотень між-атомних відстаней. Однак, як буде показано далі, МТ таких розмірів заліковуються внаслідок термоактивованої дифузії й реально існуватимуть лише тріщини з розмірами не менше, ніж

$$\tilde{l}_{\min} = (24\tilde{I}/\varepsilon)^{1/4}. \quad (15)$$

Дане співвідношення визначається з умови, що максимальне розкриття МТ $u(0)$ повинно бути не меншим, ніж міжатомна відстань. Зауважимо, що \tilde{l}' при невеликих напругах $\sigma \in$ значно меншою за \tilde{l}_{\min} . З іншого боку, використовуючи асимптотичні вирази (11) для великих \tilde{l} , отримаємо, що енергія тріщини досягає свого максимального значення

$$U_{кр} = \left(\frac{1}{2\tilde{I}} \right)^{1/4} \frac{Ea^2}{5} \sqrt{\frac{24\tilde{I}}{\varepsilon}} \quad (16)$$

при

$$\tilde{l}_{кр} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\tilde{I}} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{24\tilde{I}}{\varepsilon}}. \quad (17)$$

Тим не менше, для початку росту МТ достатньо подолати енергетичний бар'єр, який значно менший за $U_{кр}$ (16). Означимо енергію нуклеації МТ $U_{нукл}$ як значення потенціальної енергії при формуванні тріщини мінімальної довжини \tilde{l}_{\min} (15). У вищих порядках за величинами, оберненими до напружень, для неї можна записати співвідношення

$$U_{нукл} \equiv U(\tilde{l}_{\min}) \approx 0.17a^2E \left(\frac{24\tilde{I}}{\varepsilon} \right)^{1/4}. \quad (18)$$

Фізичний зміст енергії нуклеації є таким: для появи зародкових тріщин, що не заліковуються з плином часу, необхідно, щоб МТ пододала енергетичний бар'єр висотою $U_{нукл}$. Очевидно, що крім енергії нуклеації МТ існує інша характеристика, яка визначає напрямлений ріст тріщин. Визначенню енергії росту МТ, а також розрахунку загального часу розвитку МТ до стану, коли відбувається майже миттєве руйнування матеріалу, буде присвячено наступний підрозділ.

Урахування термоактивованої дифузії частинок в околі МТ

Як уже зазначалось, у реальних системах можливе проникнення частинок твердого тіла всередину МТ. Це можуть бути як частинки того самого матеріалу, що й матриця ЛПВМ, так і інші хімічно активні частинки. У першому випадку ми матимемо справу з напрямленою дифузією частинок. У другому випадку можливе послаблення міжмолекулярних зв'язків усередині вершинної зони МТ. Формально це можна зобразити [7] як зміну сили міжмолекулярної взаємодії (5) унаслідок хімічної модифікації поверхні МТ, як це зроблено на рис. 3.

Слід зауважити, що з експериментів відоме не лише послаблення міжатомних зв'язків (яке визначається від'ємною областю f), а й зміцнення матеріалу МТ унаслідок виникнення місткових зв'язків між guest-host молекулами [7]. У будь-якому випадку модифікація моделі з метою врахування тих чи інших фізико-хімічних процесів полягає у виборі форми сили міжмолекулярної взаємодії f .

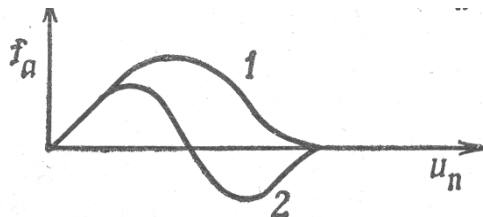


Рис. 3. Залежність сили міжмолекулярної взаємодії від розкриття МТ. Цифрою 1 позначено силу f у вигляді (5); цифрою 2 – модифікацію сили міжмолекулярної взаємодії у випадку дифузії хімічно активних молекул усередину МТ.

Надалі ми діятимемо дещо іншим чином: будемо постулювати не зміну f унаслідок термоактивованої дифузії частинок, а означимо сам перебіг процесу напрямленої дифузії. З теорії термоактивованої дифузії відомо, що в реальних системах динаміка зміни довжини МТ описується не детерміністичним, а стохастичним рівнянням, яке враховує як зміну енергії системи при рості МТ, так і вплив теплових шумів [4, 5]. Так, незважаючи на можливі локальні зменшення довжини МТ, спричинені дією флуктуації температури, у середньому спостерігається напрямлений ріст тріщини. Однак для зародкових МТ з довжинами $l < l_{\min}$ (див. рівняння (15)) можливе повне заліковування початкових дефектів. З іншого боку, напрямлений ріст МТ можливий лише на часах $\Delta t(l) \propto \exp[\gamma s(l)/k_B T]$, де в показнику експоненти стоїть енергія активації вершинної зони. На часах, менших від $\Delta t(l)$, спостерігається спонтанне заліковування МТ. Таким чином, напрямлений ріст МТ можливий лише при збільшенні довжини тріщини на величину $\Delta l \geq s(l)$ та на характерних часах $t \geq \Delta t(l)$.

Вважатимемо, що розкриття, більше за період ґратки, не може самовільно зникнути, а тріщина може поширюватись спонтанно на довжину вершинної зони $s(l)$. Оскільки середній час такого розширення згідно із законом Арреніуса $t_s(l) \propto \exp(U_2(s(l))/k_B T) \propto \exp[\gamma s(l)/k_B T]$, то швидкість направленого руху буде

$$v_{\tilde{s}(\tilde{l})} = \frac{\tilde{s}(\tilde{l})}{t_{\tilde{s}(\tilde{l})}} \propto \tilde{s}(\tilde{l}) \exp\left(-\frac{18 E a^2 \tilde{s}(\tilde{l})}{5 k_B T}\right). \quad (19)$$

Час росту до межі руйнування $\tau_p = \int_{l_{\min}}^{l_{\text{кр}}} dl / v_s(l)$ можна оцінити як

$$\tau_p \propto \tau_p^0 \exp\left(\frac{9 E a^2}{5 k_B T} \left(\frac{24 \tilde{l}}{\varepsilon}\right)^{1/4}\right). \quad (20)$$

Як видно з останнього виразу, цей час за порядком величини збігається з часом нуклеації МТ (середнім часом зародження тріщини мінімального розміру)

$$\tau_{\text{нукл}} \propto \tau_{\text{нукл}}^0 \exp\left(\frac{U_{\text{нукл}}}{k_B T}\right) = \tau_{\text{нукл}}^0 \exp\left(\frac{0.17 a^2 E}{k_B T} \left(\frac{24 \tilde{l}}{\varepsilon}\right)^{1/4}\right). \quad (21)$$

Звідси напрашується висновок, що при врахуванні напрямленої термоактивованої дифузії швидкості зародження $\tau_{\text{нукл}}^{-1}$ та росту τ_p^{-1} , по-перше, мають однаковий порядок, по-друге – вони значно менші від швидкості $\tau^{-1} \propto \exp[-U_{\text{кр}}/k_B T]$, яку передбачає теорія Гріф-

фітса, де в якості енергії активації береться значення максимуму $U(\sigma, l)$ (див. формулу (4)). Вирази (20) і (21), як було показано в роботі [5], добре надаються й для опису еволюції мікропорожнин (кластерів вакансій). Саме за таким механізмом (зародження, розвитку та коалесценції мікропор), як показують експериментальні дослідження [2], відбувається розповсюдження МТ.

Що стосується передекспоненційних множників у рівняннях (20) і (21), для їх оцінки також можна скористатись основними постулатами термоактиваційної теорії (див., наприклад, роботу [6]) і записати τ_0 у формі

$$\tau_0 = \frac{2\sqrt{2\pi Y k_B T} l_{\min}}{K(L) v_0}, \quad Y = E/l_{cr}^2, \quad K(L) = \sigma\sqrt{\pi L/2}, \quad (22)$$

де v_0 означає початкову швидкість поширення МТ, L - середню відстань, на якій релаксують термоактивовані внутрішні напруження. Зауважимо, що внаслідок наближень, які робили при отриманні (22), величина передекспоненційного множника τ_0 завищена. Крім того, ми не брали до уваги неоднорідність матеріалу ЛПВМ. У роботі [13] було показано, що врахування випадкових сил та напружень через усереднення за функцією розподілу "замороженого" безладу веде до значного підвищення (у кілька разів) ефективної температури середовища T_{ef} (або, що є тотожним, до зниження енергії активації) і зменшення тривалості існування МТ. Не приймалась також до уваги взаємодія між краями МТ у її вершинній зоні, яка може певним чином модифікувати профіль МТ, і, як наслідок, її вільну енергію [11].

Зауважимо, що розрахунок передекспоненційного множника являє собою окрему складну задачу і вимагає врахування ряду фізичних чинників, які визначають стан ЛПВМ. Відтак оцінки часу розвитку МТ на основі рівнянь (20) - (22) не можуть претендувати на особливу точність. Узявши для ефективного модуля Юнга ЛПВМ значення $E \sim 4$ ГПа (ефективний модуль Юнга враховує зменшення пружності матриці ЛПВМ унаслідок пористості та наявності МТ [10]), що в 10 разів менше від експериментально спостережних значень E [14], для деформації поклавши $\varepsilon = \sigma/E \approx 0.15$, що відповідає критичному значенню для руйнування крихких тіл, і навіть вважаючи ефективну температуру середовища T_{ef} втричі вищою від температури T всередині об'єкта "Укриття", ми отримаємо для часу розвитку МТ, що знаходиться в тонкому приповерхневому шарі завтовшки 200 нм, значення порядку десятків років, що погано узгоджується з експериментальними даними з деградації ЛПВМ [3]. Це й не дивно, адже при отриманні даних рівнянь не брався до уваги ряд таких факторів, як: (i) неоднорідність напруження на границі МТ (фактично на вістрі МТ σ прямує до безмежності); (ii) ефективна взаємодія між окремими МТ може як заліковувати МТ, так і збільшувати швидкість їх поширення; (iii) хоча експериментальні дані свідчать про незначну зміну модуля Юнга в діапазоні температур, характерному для об'єкта "Укриття" [14], у квазірозплавленій області всередині треку значення E може зменшуватись на кілька порядків; (iv) просторовий профіль внутрішніх сил та напружень в околі МТ, а також просторово-часова залежність температури всередині треку; v) генерація нових зародкових МТ унаслідок самоопромінення речовини ЛПВМ.

Висновки

У даній роботі нами представлено кілька феноменологічних моделей, що описують різні аспекти тріщиноутворення у твердих кристалічних тілах. Запропоновані моделі підходять і для опису утворення МТ в аморфних частково закристилізованих ситалових стеклах, прикладами яких є матриці ЛПВМ. Ми користувались наближенням суцільного середовища, однак враховували міжатомні сили притягання між краями МТ в околі її вершинної зони. Крім того, допускалась модифікація вершинної зони внаслідок поверхневої дифузії частинок матриці ЛПВМ та проникнення їх усередину МТ.

Результатом урахування міжатомної взаємодії між краями МТ стала поява мінімуму на кривій потенціальної енергії МТ. Присутність потенціальної ями на графіку $U(L)$ мала б означати наявність зародкових МТ певної довжини L' . Однак було показано, що врахування теплових шумів, пов'язаних з поверхневою дифузією частинок в околі МТ, приводить до заліковування малих дефектів. Напрявлений ріст МТ є можливим лише для таких тріщин, максимальне розкриття яких не менше міжатомної відстані. Як наслідок було отримано вирази для часів нуклеації та росту МТ і показано, що обидва ці часи мають однаковий порядок за величиною деформації. Обидва ці характерні часи набагато менші від величин, які дають різні модифікації теорії Гріффітса, що, безумовно, слід враховувати при прогнозуванні довготривалої поведінки ЛПВМ. Таким чином, поверхнева дифузія частинок в околі МТ має двоякий вплив на міцність матриць ЛПВМ: з одного боку, вона сприяє заліковуванню початкових дефектів, з іншого – значно знижує активаційний бар'єр росту тріщини.

Усе вищенаведене дозволяє нам зробити наступні висновки та окреслити ряд задач, що, на нашу думку, мають певну перспективу з точки зору моделювання поведінки ЛПВМ.

1. Урахування просторового розподілу зовнішніх напружень формує певний скейлінг енергій активації МТ у вигляді $\varepsilon^{-\alpha}$, де α – додатне число. У нашому випадку рівномірно розподілених зовнішніх напружень активаційні бар'єри знижувались з ростом σ як $\varepsilon^{-1/4}$. У роботі [11] для лінійних розтягуючих зусиль ми отримали залежність $\varepsilon^{-1/3}$. Крім цього було показано, що при певній геометрії МТ можлива наявність двох енергій росту.

2. Запропонований формалізм підходить для опису поширення зародкових МТ, максимальне розкриття яких становить, принаймні, кілька десятків міжатомних відстаней. У випадку $y(0) \ll a$ можна провести лише числовий аналіз часів нуклеації та росту МТ, оскільки внаслідок домінуючої ролі сил міжатомної взаємодії неможливо отримати аналітичні вирази для профілю МТ.

3. Ми залишили поза увагою інші механізми тріщиноутворення, зокрема дислокаційний. Однак, якщо відомі результати для профілю МТ, отримані при врахуванні деформацій ковзання, наша теорія дає змогу провести оцінку часу життя МТ і в цьому випадку.

4. Основні постулати нашого підходу дають можливість розрахувати час існування МТ у випадку довільного просторового розподілу зовнішніх напружень.

5. Урахування перебігу інших фізико-хімічних процесів в околі МТ, наприклад дифузії іонів радіонуклідів, можна провести, ефективним чином моделюючи форму сил міжатомної взаємодії. У такому випадку можлива ситуація, коли координата локальних мінімумів на енергетичній кривій буде справа від l_{min} , тобто в матриці можлива поява великої кількості довгоживучих МТ навіть при невеликих зовнішніх напруженнях.

Для більш точної прогнозування часу життя МТ ми повинні володіти додатковою інформацією про цілий ряд фізико-хімічних характеристик ЛПВМ.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Ключников О.О.* Современное состояние объекта ``Укрытие`` и реализация международного проекта его преобразования в экологически безопасную систему (SIP) // Проблемы Чернобиля. - 2002. - Вып. 11. - С. 6 - 11.
2. *Marliere C., Prades S., C'elarie F. et al.* Crack fronts and damage in glass at the nanometer scale // J. Phys.- Condens. Mat. - 2003. - Vol. 15. - P. S2377 - S2386.
3. *Baryakhtar V., Gonchar V., Zhydkov A., Zhydkov V.* Radiation damages and self-sputtering of high-radioactive dielectrics: spontaneous emissuin of submicronic dust particles // Condens. Matter Phys. - 2002. - Vol. 5, No. 3(31). - P. 449 - 471.
4. *Golubovic L., Feng Sh.* Rate of microcrack nucleation // Phys. Rev. A. - 1991. - Vol. 43. - P. 5223 - 5227.
5. *Golubovic L., Peredra A.* Mechanism of time-delayed fractures // Phys. Rev. E. - 1995. - Vol. 51. - P. 2799 - 2804.
6. *Santucci S., Vanel L., Guarino A. et al.* Thermal activation of rupture and slow crack growth in a model of homogeneous brittle materials // Europhys. Lett. - 2003. - Vol. 62, No. 3. - P. 320 - 324.

7. *Атомистика* разрушения: Сб. ст. / Под ред. А. Ю. Ишлинского, Г. Г. Черного. - М.: Мир, 1987. - 248 с.
8. *Griffith A.A.* The phenomena of rupture and flow in solids // *Phil. Trans. Roy. Soc. London A.* - 1920. - Vol. 221. - P. 163 - 198.
9. *Френкель Я.И.* Теория обратимых и необратимых трещин в твердых телах // *ЖЭТФ.* - 1952. - Т. 22, вып. 11. - С. 1857 - 1866.
10. *Мрыглад И.М., Фищук И.И., Зинец О.С. и др.* Разработка расчетно-аналитической модели поведения ТСМ (WBS A03 00000): (Отчет о НИР) / МНТЦ "Укрытие" НАН Украины. -2004 - 161 с.
11. *Верхоляк Т.М., Ігнатюк В.В.* Аналіз найпростіших моделей формування мікротріщин. - Львів, 2005. - 12 с. - (Препр. / НАН України. ІФКС; ІСМР-05-16U).
12. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. - М.: Наука, 1965. - 204 с.
13. *Politi A., Ciliberto S., Scoretti R.* Failure time in the fiber-bundle model with thermal noise and disorder // *Phys. Rev. E.* - 2002. - Vol. 66. - P. 026107.
14. *Жидков В.О., Чемерський Г.Ф.* Експериментальне визначення динамічних пружних констант лавоподібних паливовмісних матеріалів // *Проблеми Чорнобиля.* - 2004. - Вип. 15. - С. 103 - 106.

Надійшла до редакції 15.06.07

**9 НЕКОТОРЫЕ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ОПИСАНИЮ ОБРАЗОВАНИЯ
МИКРОТРЕЩИН В ЛАВООБРАЗНЫХ ТОПЛИВОСОДЕРЖАЩИХ МАТЕРИАЛАХ**

В. В. Игнатюк, Т. М. Верхоляк

Путем теоретического моделирования получены выражения для времен нуклеации и роста микротрещин внутри лавообразных топливосодержащих материалов. Проведены оценки соответствующих энергий активации. Показано, что учет геометрии трещины, межатомного взаимодействия между ее краями и термоактивированной диффузии частиц ведет к уменьшению критических значений напряжений, при которых достигается мгновенное разрушение материала.

**9 SOME PHENOMENOLOGICAL APPROACHES TO DESCRIPTION OF MICROCRACK FORMATION
IN LAVA-LIKE FUEL CONTAINING MATERIALS**

V. V. Ignatyuk, T. M. Verkholyak

By means of theoretical modeling, the expressions for the nucleation and growth times of microcracks inside the lava-like fuel containing materials are obtained. Estimation of the corresponding activation energies is carried out. It is shown that taking into account geometry of a crack and the interatomic interaction between its edges leads to decreasing of critical stresses, at which the instant material destruction occurs.