

УДК 539.375

© 1993 г. А. В. АНДРЕЕВ, В. М. КОРНЕВ, Ю. В. ТИХОМИРОВ

ОБРЫВ АТОМНЫХ СВЯЗЕЙ В ВЕРШИНЕ ТРЕЩИНЫ. ПОТЕРЯ УСТОЙЧИВОСТИ УЧАСТКА ЦЕПОЧКИ АТОМОВ

В исследованиях прочности и разрушения твердых тел придается сейчас все большее значение подходам, связанным с учетом дискретности строения материала. Причины этого, а также основные идеи и направления таких подходов изложены в обзоре [1]. Один из авторов обзора, В. В. Новожилов, в [2] предложил основанную на учете атомного строения тел концепцию, рассматривающую трещины-разрезы как нетривиальные формы равновесия упругих тел с физически нелинейными свойствами при наличии растягивающей нагрузки. При этом физическая нелинейность свойств тела обусловлена законом межатомного взаимодействия. В. В. Новожилов сформулировал в [2] также критерий хрупкой прочности, известный в литературе как дискретный критерий Новожилова.

Однако (по признанию самого автора [2]) его исследование носило качественный характер; так, в роли закона взаимодействия атомов тела выступала некоторая простая и удобная для вычислений математическая форма зависимости силы связи двух атомов от разделяющего их центры расстояния.

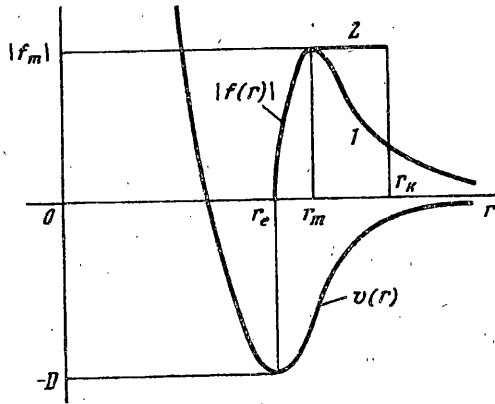
В публикуемой работе предпринята попытка количественного анализа подходов В. В. Новожилова на основе использования реалистичных парных межатомных потенциалов центральных сил, относительно возможности и диапазона применения которых к расчетам прочности см., например, [3].

В первой части работы исследуется потеря устойчивости атома, входящего в линейную цепочку, прочие атомы которой сохраняют свои идеальные положения при ее растяжении. Во второй части, следуя В. В. Новожилову, рассматривается задача о трещине Гриффитса с учетом взаимодействия берегов. Произведенные расчеты сопоставляются с результатами и выводами [2].

1. Рассмотрим при 0 К бесконечную линейную цепочку однотипных атомов с точечными массами, допускающих перемещение только вдоль линии цепочки. Межатомное взаимодействие будем считать центральным и парным, так что потенциальная энергия v взаимодействия двух атомов есть функция расстояния r между ними. Типичный график функции $v(r)$ для двух изолированных атомов представлен на фиг. 1. В отсутствие внешних воздействий $v(r)$ имеет при $r = r_e$ минимум, равный $-D$, D — энергия диссоциации связи. В этом равновесном состоянии сила взаимодействия атомов $f(r) = -dv(r)/dr$ равна нулю. Если связь подвергается растяжению ($r > r_e$), то абсолютная величина силы f (кривая 1 на фиг. 1) при $r = r_m$ достигает максимального значения $|f_m|$. В массиве атомов вследствие их взаимного влияния равновесное расстояние может отличаться от r_e .

Обозначим r_0 расстояние между соседними атомами цепочки в начальном равновесном состоянии при отсутствии внешних воздействий. Будем растягивать цепочку приложенными на бесконечности внешними силами, направленными вдоль цепочки, равными по абсолютной величине и противоположными по направлению. Тогда расстояния между атомами изменятся: предполагается, что изменения происходят достаточно медленно, так что цепочка (и каждый ее атом в отдельности) остается в состоянии квазистатического равновесия.

Возьмем произвольный атом цепочки, присвоив ему номер (нуль), а все прочие атомы занумеруем целыми числами (см. фиг. 2). Будем считать, что



Фиг. 1.

при растяжении атомы с номерами $\dots, -3, -2, -1, 1, 2, 3, \dots$ всегда занимают положения, отвечающие идеальной структуре растянутой цепочки, т. е.

$$\dots = r_{-3, -2} = r_{-2, -1} = 0,5r_{-1, 1} = r_{1, 2} = r_{2, 3} = \dots \quad (1.1)$$

Нашей задачей будет описание поведения выбранного «нулевого» атома в зависимости от степени растяжения цепочки. В качестве параметра, характеризующего степень растяжения, очевидно, можно взять абсолютную величину внешнего усилия T или, что более удобно, длину связи между ближайшими соседями.

Пусть цепочка растянута до состояния, в котором длины связей, фигурирующие в (1.1), равны некоторой величине R . Зафиксируем все атомы цепочки, кроме нулевого, в занимаемых ими «идеальных» положениях. Тогда положение нулевого атома полностью определяется одной из величин $r_{-1, 0}, r_{0, 1}$ — расстояний до его ближайших соседей (см. фиг. 2). Выберем в качестве определяющей величину $r_{-1, 0}$, тогда, поскольку $r_{-1, 1} = 2R$, имеем

$$r_{0, 1} = 2R - r_{-1, 0} \quad (1.2)$$

Определим положения равновесия нулевого атома при разных значениях R . Будем учитывать взаимодействие не только первых (ближайших), но и вторых (через один) соседей-атомов. Тогда приходящаяся на нулевой атом часть W_0 полной потенциальной энергии взаимодействия атомов цепочки W составит $W_0 = 0,5 [v(r_{-1, 0}) + v(r_{0, 1}) + v(r_{-2, 0}) + v(r_{0, 2})]$, или, учитывая (1.2):

$$W_0 \equiv W_0(r_{-1, 0}; R) = 0,5 [v(r_{-1, 0}) + v(2R - r_{-1, 0}) + v(R + r_{-1, 0}) + v(3R - r_{-1, 0})] \quad (1.3)$$

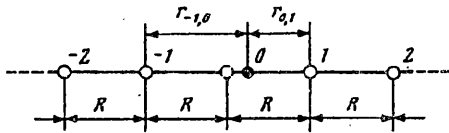
Возьмем в качестве потенциала межатомного взаимодействия функцию Морса $v(r) = D \{ \exp [-2\alpha (r - r_e)] - 2 \exp [-\alpha (r - r_e)] \}$ (1.4)

Здесь D, α, r_e — параметры, определяемые типом атомов. Введем безразмерные переменные

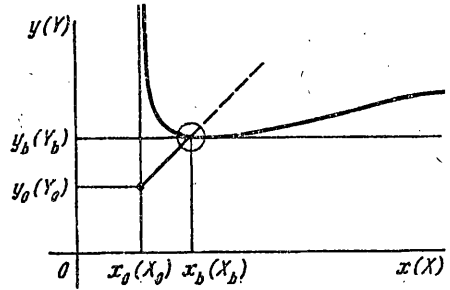
$$x = \exp [\alpha (r_{-1, 0} - r_e)], \quad y = \exp [\alpha (R - r_e)] \quad (1.5)$$

Формулы (1.5) устанавливают взаимно однозначное соответствие между величинами x, y и $r_{-1, 0}, R$, и можно решать поставленную задачу в переменных x, y . Переходя к ним в выражении (1.3), получим

$$W_0 \equiv W_0(x, y) = 0,5D (x^{-2} - 2x^{-1} + x^2y^{-4} - 2xy^{-2} + e^2x^{-2}y^{-2} - 2ex^{-1}y^{-1} + e^2x^2y^{-6} - 2exy^{-3}) \quad (1.6)$$



Фиг. 2



Фиг. 3

Здесь $\varepsilon = \exp(-\alpha r_0)$ — малая величина, определяемая типом атомов цепочки. Для 16 металлов, взаимодействие атомов которых, согласно [4], можно описать потенциалом (1.4), величина не превосходит 0,05, точнее, $1/88 < \varepsilon < 1/23$.

Замечание 1. В формуле (1.6) находит отражение следующее. Если v_k — энергия взаимодействия двух атомов — k -х соседей в цепочке с законом меж-атомного взаимодействия (1.4) и расстояния между первыми соседями в цепочке не превосходят или близки к r_m — критическому для пары атомов, то $v_k = \varepsilon^{k-1} O(v_1)$.

Будем считать величину R и соответствующую ей величину y фиксированными. Тогда отыскание положений равновесия нулевого атома сводится к решению уравнения равновесия

$$\partial W_0(x, y) / \partial x = 0 \quad (1.7)$$

В силу того, что $\partial W_0(x, y) / \partial x = Dx^{-3}y^{-6}(-y^6 + xy^6 + x^4y^2 - x^3y^4 - \varepsilon^2y^4 + \varepsilon xy^5 + \varepsilon^2x^4 - \varepsilon x^3y^3)$, уравнение (1.7) сводится к уравнению четвертой степени относительно x , которое в свою очередь можно преобразовать к виду

$$(x - y)(x + y)[x^2(y^2 + \varepsilon^2) - xy^3(y + \varepsilon) + y^2(y^2 + \varepsilon^2)] = 0 \quad (1.8)$$

Уравнение (1.8) имеет три положительных корня

$$x = x_{(1)} = y \quad (1.9)$$

$$x = x_{(2,3)} = \frac{y^3(y + \varepsilon)}{2(y^2 + \varepsilon^2)} \left\{ 1 \pm \left[1 - \left(\frac{2(y^2 + \varepsilon^2)}{y^2(y + \varepsilon)} \right)^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (1.10)$$

причем действительные корни $x_{(2)}, x_{(3)}$ в (1.10) соответственно со знаками (+), (—) существуют при условии

$$2(y^2 + \varepsilon^2) \leq y^2(y + \varepsilon) \quad (1.11)$$

Таким образом, при каждом фиксированном значении y существуют одно ($x_{(1)}$) либо три значения x , отвечающих стационарным значениям потенциальной энергии W_0 нулевого атома.

С помощью второй производной $\partial^2 W_0(x, y) / \partial x^2 = Dx^{-4}y^{-6}[(3y^4 + x^4)(y^2 + \varepsilon^2) - 2xy^5(y + \varepsilon)]$ можно определить, что при условии $2(y^2 + \varepsilon^2) > y^2(y + \varepsilon)$ единственный корень $x = x_{(1)}$ уравнения равновесия (1.7) соответствует минимуму функции W_0 .

При выполнении равенства

$$2(y^2 + \varepsilon^2) = y^2(y + \varepsilon) \quad (1.12)$$

уравнение (1.7) имеет три совпадающих корня $x = x_{(1)} = x_{(2)} = x_{(3)} = y$. Функция W_0 имеет минимум, поскольку при этом значении x $\partial^2 W_0 / \partial x^2 = 0$,

$\partial^3 W_0 / \partial x^3 = 0$ и лишь $\partial^4 W_0 / \partial x^4$ отлична от нуля и положительна. Решая методами теории ветвления [5] уравнение $y^3 + y^2(-2 + \varepsilon) - 2\varepsilon^2 = 0$, находим удовлетворяющее условию (1.12) значение y , представленное в виде сходящегося ряда по целым положительным степеням малого параметра ε :

$$y_b = 2 [1 - \varepsilon/2 + \varepsilon^2/4 + o(\varepsilon^2)]. \quad (1.13)$$

При $2(y^2 + \varepsilon^2) < y^2(y + \varepsilon)$ корни уравнения (1.8) различны. Корень $x = x_{(1)}$ в этом случае отвечает максимуму функции W_0 . Поскольку при $x = x_{(2)}$ и $x = x_{(3)}$ имеет место тождество $(x^2 + y^2)(y^2 + \varepsilon^2) - xy^3(y + \varepsilon) \equiv 0$, нетрудно показать, что при этих значениях x производная $\partial^2 W_0 / \partial x^2$ положительна, т. е. функция W_0 имеет минимумы.

Имеем, таким образом, в пространстве $\{x, y\}$ основную и вторичную траектории равновесия нулевого атома (фиг. 3). Основная траектория характеризуется симметрией $r_{-1,0} = r_{0,1} = R$ (что следует из (1.2) и (1.9)) и теряет устойчивость в точке ветвления $(x, y) = (y_b, y_b)$ — точке пересечения ее с устойчивой вторичной траекторией, ветви которой определены соотношениями (1.10) и характеризуются несимметрией $r_{-1,0} \neq r_{0,1}$.

Составим теперь общую картину поведения выбранного атома при растяжении цепочки. За характеристику растяжения удобно взять параметр y (см. фиг. 3).

1. $y = y_0 = \exp[\alpha(r_0 - r_e)]$; начальное состояние. Воздействие внешних сил отсутствует, цепочка нерастянута, длина связи между ближайшими соседями равна r_0 . Единственный корень $x = x_{(1)} = y_0$ уравнения (1.7) определяет устойчивое равновесное состояние нулевого атома с идеальным — симметричным относительно ближайших соседей — положением и равными длинами связей;

2. $y_0 < y < y_b$, где y_b определено формулой (1.13); цепочка растягивается, длины связей ближайших соседей, подчиняющиеся условию (1.1), растут в пределах $r_0 < R < r_e + \alpha^{-1} \ln y_b$. По-прежнему единственный корень $x = x_{(1)} = y$ уравнения равновесия (1.7) определяет устойчивое (минимум энергии W_0) равновесное положение нулевого атома с симметрией относительно ближайших соседей;

3. $y = y_b$; критическое значение параметра y и соответствующей величины R , равной $R_b = r_e + \alpha^{-1} \ln y_b$. Уравнение (1.7) имеет три совпадающих корня $x_{(1)} = x_{(2)} = x_{(3)} = y_b$, отвечающих минимуму W_0 . Еще сохраняется симметричное расположение нулевого атома относительно ближайших соседей;

4. $y > y_b$; из трех различных корней уравнения (1.7), (см. соотношения (1.9), (1.10)), корень $x = x_{(1)}$ соответствует максимуму W_0 , два остальных — минимумам. Отвечающее $x_{(1)}$ симметричное положение нулевого атома неустойчиво, поэтому при превышении критического значения $y = y_b$ (т. е. превышения длинами связей величины $R = R_b$) нулевой атом немедленно переходит в одно из устойчивых состояний, определяемых корнями $x_{(2)}, x_{(3)}$, оказываясь притянутым к одному из своих ближайших соседей. Из соотношения $x_{(2)}x_{(3)} = y^2$ и неравенства $x_{(2)} > x_{(3)}$ вытекает, что если $x = x_{(2)}$, то $r_{-1,0}^{(2)} = r_e + \alpha^{-1} \ln x_{(2)} > r_{0,1}^{(2)} = r_e + \alpha^{-1} \ln x_{(3)}$, и нулевой атом притягивается первым атомом. Если $x = x_{(3)}$, то $r_{-1,0}^{(3)} = r_e + \alpha^{-1} \ln x_{(3)} < r_{0,1}^{(3)} = r_e + \alpha^{-1} \ln x_{(2)}$, и нулевой атом притянут к атому с номером «минус один». Заметим, что $r_{-1,0}^{(2)} = r_{0,1}^{(3)}$, $r_{-1,0}^{(3)} = r_{0,1}^{(2)}$, т. е. устойчивые положения нулевого атома взаимно симметричны относительно его идеального положения. Используя соотношение $x_{(2)}x_{(3)} = y^2$, можно показать, что разность $W_0(x_{(2)}, y) - W_0(x_{(3)}, y) = 0$, вследствие чего нельзя сказать с определенностью, какому из несимметричных положений

атом отдаст предпочтение, это зависит, по-видимому, от отклонения структуры рассматриваемой системы от идеальной.

Заменим в наших рассуждениях потенциал Морса на потенциал Леннард — Джонса

$$v(r) = D [(r_e/r)^{12} - 2 (r_e/r)^6] \quad (1.14)$$

где параметры D, r_e определяются типом атомов. Введем безразмерные переменные $X = r_{-1,0}/r_e, Y = R/r_e$. Тогда потенциальная энергия нулевого атома составит (см. (1.3)):

$$W_0 \equiv W_0(X, Y) = 0,5D (X^{-12} - 2X^{-6} + (2Y - X)^{-12} - 2(2Y - X)^{-6} + (X + Y)^{-12} - 2(X + Y)^{-6} + (3Y - X)^{-12} - 2(3Y - X)^{-6}]$$

Замечание 2. Если в цепочке атомов с взаимодействием по закону (1.14) расстояния между первыми соседями не превосходят или близки к критическому для пары атомов расстоянию r_m , то $v_k = \varepsilon_k \cdot O(v_1)$, где $\varepsilon_k = k^{-6}$, v_k — энергия взаимодействия двух атомов — k -х соседей.

Пусть значение Y фиксировано, имеем

$$\partial W_0(X, Y) / \partial X = 6DX^{-13} (2Y - X)^{-13} (X + Y)^{-13} (3Y - X)^{-13} F(X, Y)$$

где $F(X, Y)$ — многочлен от X . Уравнение равновесия $\partial W_0(X, Y) / \partial X = 0$ равносильно уравнению

$$F(X, Y) = 0 \quad (1.15)$$

Группируя надлежащим образом слагаемые в левой части (1.15), находим решение

$$X = X_{(1)} = Y \quad (1.16)$$

определяющее в пространстве $\{X, Y\}$ основную траекторию равновесия нулевого атома с симметричным расположением его относительно ближайших соседей. Отыскать остальные решения уравнения равновесия в явном виде затруднительно, поэтому ограничимся построением их в окрестности точки ветвления $(X, Y) = (Y_b, Y_b)$ решения (1.16), которую определяем из условия ветвления $\partial^2 W_0(X, Y) / \partial X^2|_{X=Y} = 0$. Вычисления дают значение Y_b параметра Y в точке ветвления ($\varepsilon_2 = 2^{-6}$):

$$Y_b = \left(\frac{13}{7}\right)^{1/6} \left(\frac{4 + 2^{-12}}{4 + 2^{-6}}\right)^{1/6} = \left(\frac{13}{7}\right)^{1/6} \left[1 - \frac{\varepsilon_2}{24} + O(\varepsilon_2^2)\right] \approx 0,9994 \left(\frac{13}{7}\right)^{1/6} \quad (1.17)$$

Решая методами теории ветвления [5] уравнение (1.15), имеем в окрестности точки ветвления помимо решения (1.16) еще два, определенные при $Y \geq Y_b$ и представленные в виде рядов

$$X = X_{(2),(3)} = Y_b + \sum_{k=1}^{\infty} b_k^{(2),(3)} (Y - Y_b)^{k/2} \quad (1.18)$$

$$b_1^{(2),(3)} = \pm \left[\frac{6(1 + 2^{-8})(1 + 2^{-14}) Y_b}{23 + 2^{-3} - 13 \cdot 2^{-16} + 23 \cdot 2^{-24}} \right]^{1/2} = \pm \left(\frac{6Y_b}{23}\right)^{1/2} \left[1 - \frac{9}{23 \cdot 8} \varepsilon_2 + O(\varepsilon_2^2)\right]$$

где $X_{(2)}$ и $X_{(3)}$ — второй и третий корни соответственно, причем для второго корня выбираем знак плюс и $b_k^{(2)}$, а для третьего — минус и $b_k^{(3)}$; $b_k^{(2),(3)}$ — вещественные коэффициенты. Основная траектория равновесия нулевого атома теряет устойчивость в точке ветвления при значении $R = R_b = Y_b r_e$; две ветви устойчивой вторичной траектории равновесия определяются в окрестности точки ветвления

соотношениями (1.18). В целом поведение нулевого атома при растяжении цепочки сходно с описанным выше для функции Морса (см. фиг. 3).

Отметим, что качественный характер результатов не меняется, если учитывать взаимодействие только ближайших соседей. Количественные изменения при этом малы, и их можно связать с величинами фигурирующих в замечаниях 1 и 2 малых параметров ϵ и ϵ_2 , которые выступают как параметры учета дальнего действия. Так, для потенциала Морса значение y в точке ветвления становится равным 2, а уравнения траекторий принимают вид

$$x = x_{(1)}^\circ = y, \quad x = x_{(2),(3)}^\circ = \frac{y^2}{2} \left\{ 1 \pm \left[1 - \left(\frac{2}{y} \right)^2 \right]^{1/2} \right\} \quad \text{при } y \geq 2$$

Для потенциала Леннарда — Джонса в точке ветвления $Y = Y_b^\circ = (13/7)^{1/6}$, а траектории равновесия задаются соотношениями

$$X = X_{(1)}^\circ = Y, \quad X = X_{(2),(3)}^\circ = Y_b^\circ + \sum_{k=1}^{\infty} b_{0k}^{(2),(3)} (Y - Y_b^\circ)^{k/2}$$

$$b_{01}^{(2),(3)} = \pm (6Y_b^\circ/23)^{1/2} \quad \text{при } Y \geq Y_b^\circ$$

Определим теперь величину внешнего усилия T , с которым нужно растягивать цепочку, чтобы она потеряла способность сопротивляться деформации. Ограничимся случаем функции Морса. Рассмотрим идеальную n -атомную цепочку (n — число целое, $n \geq 3$), обладающую теми же свойствами, что и исследуемая бесконечная. Считая цепочку сохраняющей при растяжении идеальную структуру с равными длинами R связей между ближайшими (первыми) соседями (допустимость пренебрежения некоторым граничным эффектом станет очевидной впоследствии при предельном переходе), запишем выражение для полной энергии системы «цепочка + внешние усилия»:

$$V = W - A \tag{1.19}$$

где W — потенциальная энергия взаимодействия атомов цепочки, A — работа внешних сил. Если v_k ($k = 1, 2$) — энергия взаимодействия двух атомов (k -х соседей), то $W = (n-1)v_1 + (n-2)v_2$. В обозначениях (1.5):

$$v_1 \equiv v_1(y) = D(y^{-2} - 2y^{-1}), \quad v_2 \equiv v_2(y) = D(\epsilon^2 y^{-4} - 2\epsilon y^{-2}) \tag{1.20}$$

Сила $T_{(n)}$ вызывает удлинение каждой из $n-1$ связей атомов — первых соседей на величину $R - r_0 = \alpha^{-1} \ln(y y_0^{-1})$, где $y_0 = \exp[\alpha(r_0 - r_e)] = \text{const}$. Тогда выражение (1.19) принимает вид

$$V(y, T_{(n)}) = (n-1)v_1(y) + (n-2)v_2(y) - (n-1)\alpha^{-1} \ln(y y_0^{-1}) T_{(n)}$$

В состоянии равновесия должно выполняться условие $\partial V(y, T_{(n)})/\partial y = 0$, из которого находим, что

$$T_{(n)} = \alpha y [dv_1(y)/dy + (n-2)(n-1)^{-1} dv_2(y)/dy] \tag{1.21}$$

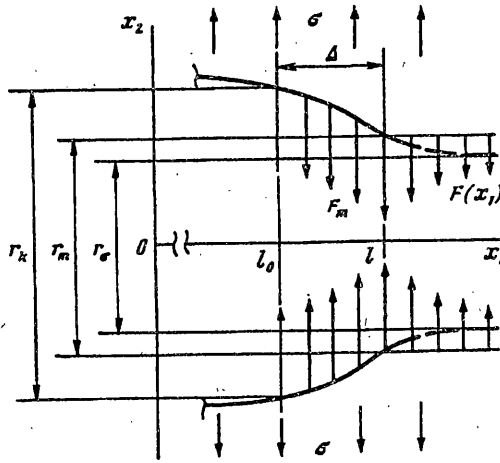
Теперь, переходя в формуле (1.21) к пределу при $n \rightarrow \infty$, получаем выражение для усилия T , растягивающего бесконечную цепочку

$$T = \lim_{n \rightarrow \infty} T_{(n)} = \alpha y [dv_1(y)/dy + dv_2(y)/dy]$$

Подставляя в это соотношение формулы (1.20), имеем

$$T \equiv T(y) = 2D\alpha (-y^{-2} + y^{-1} - 2\epsilon^2 y^{-4} + 2\epsilon y^{-2}) \tag{1.22}$$

Значение параметра y , при котором достигается максимальное значение усилия T , находится из уравнения $dT(y)/dy = 0$, которое сводится к уравнению $y^3 + (-2 + 4\epsilon)y^2 - 8\epsilon^2 = 0$. Решая последнее методами теории ветвления [5],



Фиг. 4

находим решение в виде сходящегося ряда по целым степеням малого параметра ε :

$$y_m = 2 [1 - 2\varepsilon + \varepsilon^2 + o(\varepsilon^2)] \quad (1.23)$$

Соответствующая величина T_m усилия T , вычисляемая из (1.22), равна

$$T_m = 0,5D\alpha [1 + 2\varepsilon + O(\varepsilon^2)] \quad (1.24)$$

Сравнивая значения параметра y в точке максимума усилия T и в точке ветвления основной траектории равновесия нулевого атома (см. (1.13)), замечаем, что $y_m < y_b < 2 = \exp[\alpha(r_m - r_0)]$ и соответственно $R_m < R_b < r_m$, хотя и достаточно близки друг к другу (близость характеризуется величиной порядка $O(\varepsilon)$). Это означает, что в рассматриваемом случае растяжения цепочка в целом теряет способность сопротивляться приложенным усилиям прежде, чем станет неустойчивым идеальное положение какого-либо ее атома.

Заметим еще, что при ограничении взаимодействия атомов взаимодействием только ближайших соседей наблюдается совпадение значений $y_m = y_b = 2$, а величина T_m в этом случае совпадает с известной соответствующей величиной $|f_m| = 0,5D\alpha$ для растягиваемой двухатомной цепочки. Как видно из формулы (1.24), учет взаимодействия вторых соседей существенно не влияет на критическую величину усилия, сохраняя справедливость подхода В. В. Новожилова [2].

2. Согласно изложенной в [2] концепции подобная описанной выше локальная — на отдельных участках смежных атомных слоев — потеря устойчивости тривиальной формы равновесной деформации упругого тела приводит к образованию щелевидных областей, нарушающих его сплошность. Одной из форм равновесия тела под действием растягивающих напряжений может быть та, при которой в теле образуется бесконечно длинная плоская щель, перпендикулярная направлению растяжения, — так называемая трещина Гриффитса.

В. В. Новожилов [2] рассмотрел задачу о трещине такого типа в условиях плоского напряженного состояния, опираясь на формулы Леонова — Панасюка [6, 7], определяющие распределение нормального напряжения на продолжении трещины и ее профиль, при условии, что берега трещины взаимодействуют по линеаризованному закону. Поскольку этот закон в [2] не был соотнесен с каким-либо из реалистичных, ниже рассмотрена задача о трещине Гриффитса, следуя подходу В. В. Новожилова, в предположении, что взаимодействие атомов тела описывается одним из потенциалов, приведенных в п. 1 (Морса и Леннард —

Джонса), а также обобщенным Морса $D(m-1)^{-1}\{\exp[-m\alpha(r-r_0)] - m \exp[-\alpha(r-r_0)]\}$ и Ми $Dmn(n-m)\{n^{-1}(r_0/r)^n - m^{-1}(r_0/r)^m\}$, $n > m$.

Для того чтобы в последующем при применении дискретного критерия Новожилова не вступать в противоречие с некоторыми положениями расчетной модели твердого тела [7], воспользуемся формулами, аналогичными формулам Леонова — Панасюка, но выведенными иным путем другими авторами (см., например, [8, с. 38]). В наиболее удобном для нас виде формулы представлены в [9].

В [9] предполагается, что плоскость трещины $x_2 = 0$ в декартовой системе координат x_1, x_2, x_3 проходит симметрично между двумя смежными параллельными атомными плоскостями твердого тела бесконечных размеров, разделяя его на одинаковые изотропные линейно-упругие полупространства с взаимодействием, определяемым интенсивностью F сил сцепления упомянутых атомных плоскостей (сил взаимодействия f противоположащих атомов). Интенсивность $F(r) = r_e^{-2}f(r)$ зависит от расстояния r между плоскостями, являющегося в свою очередь функцией точки плоскости $x_2 = 0$.

Считается, что у сплошного бездефектного тела в недеформированном состоянии $r = r_0$, $F = F(r_0) = 0$. Приложение на бесконечности по нормали к плоскости $x_2 = 0$ однородного растягивающего напряжения $\sigma_{22} = \sigma$ изменяет расстояние r до величины r_σ такой, что $F(r_\sigma) = -\sigma$.

Принимается далее, что область Ω плоскости $x_2 = 0$ занимает трещина, раскрываемая действием напряжения σ . Атомная природа сил сцепления подразумевает существование максимального значения F_m их интенсивности (см. фиг. 1). В [9] краем (фронтом) трещины (т. е. границей Ω) считаются точки плоскости $x_2 = 0$, в которых $F = F_m$ и соответственно $r = r_m$, $F(r_m) = F_m$. На достаточном удалении от края трещины внутри нее r намного превосходит r_m , тогда как вне ее стремится к r_σ , причем разность $r_m - r_\sigma$ мала в сравнении с r_m . Это дает основание авторам [9] считать $r = r_m$ всюду вне трещины (см. фиг. 4). Вместе с тем распределение F вне трещины сильнонеоднородно, поэтому остается неизвестной функцией, зависящей теперь уже только от положения точки в плоскости $x_2 = 0$ (см. выше определение F). Внутри же трещины неизвестно распределение r , зато предполагается известным вид F как функции от r .

Решение в рамках описанной модели задачи линейной теории упругости о бесконечном теле с трещиной, интенсивность сил сцепления поверхностей которой есть $F(r)$, позволяет найти распределение нормальных напряжений на продолжении трещины и профиль ее раскрытия. В случае трещины Гриффитса, занимающей область $\Omega = \{-l \leq x_1 \leq l, -\infty < x_3 < \infty\}$, решение соответствующей двумерной граничной задачи (в условиях плоской деформации) таково [9]. Величина раскрытия трещины

$$r(x_1) = r_m + 8(1 - \nu^2)(\pi E)^{-1} \int_{x_1}^l u (u^2 - x_1^2)^{-1/2} \left[\int_0^u (\sigma + F(r(s)))(u^2 - s^2)^{-1/2} ds \right] du$$

$$\text{при } 0 \leq x_1 \leq l \quad (2.1)$$

а распределение нормального напряжения вне трещины

$$\sigma_{22}(x_1, 0) = \sigma - \frac{2}{\pi} \frac{d}{dx_1} \left\{ \int_0^l u (x_1^2 - u^2)^{-1/2} \left[\int_0^u (\sigma + F(r(s)))(u^2 - s^2)^{-1/2} ds \right] du \right\}$$

$$\text{при } x_1 > l \quad (2.2)$$

Здесь $\sigma_{22}(x_1, \pm\infty) = \sigma$, l — полудлина трещины, рассматриваемой как разрез $\{-l \leq x_1 \leq l, x_2 = 0\}$ в плоскости $x_2 = 0$, $F(r(x_1))$ — распределение интенсивности

сил сцепления берегов трещины, E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона. Формулы выведены в предположении, что $r(x_1)$ и $F(r(x_1))$ — четные функции от x_1 .

Если энергия взаимодействия атомов тела определяется потенциальной функцией $v(r)$, то интенсивность сил сцепления атомных плоскостей и действующее между ними напряжение могут быть найдены по формуле

$$F(r) = -\sigma(r) = -r_e^{-2} dv(r)/dr = r_e^{-2} f(r) \quad (2.3)$$

Однако сильная нелинейность реалистичных потенциалов делает чрезвычайно затруднительным решение вытекающего из формулы (2.1) интегрального уравнения. В связи с этим, следуя В. В. Новожилову, прибегнем к частичной линеаризации исходного закона взаимодействия, вводя радиус обрезания r_k потенциальной функции и предполагая, что в пределах изменения r от r_m до r_k сила взаимодействия атомов f постоянна и равна максимальной f_m (кривая 2 на фиг. 1). Величина r_k определяется из требования совпадения значений γ_1 и γ_2 плотности поверхностной энергии γ , выделяющейся при продвижении фронта трещины, для исходной и аппроксимирующей зависимостей соответственно; γ находится по формуле

$$\gamma = \frac{1}{2} \int_{r_m}^{\infty} \sigma(r) dr \quad (2.4)$$

Будет удобным, отыскав модуль Юнга из соотношения

$$E = d\sigma(\eta)/d\eta, \quad \eta = (r - r_e)/r_e$$

и максимальное значение напряжения $\sigma_m = \sigma(r_m)$, представить γ в виде

$$\gamma = \beta r_e \sigma_m^2 E^{-1} \quad (2.5)$$

где β — характерная для данного потенциала числовая постоянная. Ниже приведены результаты расчета величин $r_m^{(j)}$, $E^{(j)}$, $\beta^{(j)}$ и $r_k^{(j)}$ ($j=1-4$) для потенциалов Морса ($j=1$), Леннард — Джонса ($j=2$), обобщенного Морса ($j=3$) и Ми ($j=4$).

$$r_m^{(1)} = r_e + \alpha^{-1} \ln 2, \quad r_k^{(1)} = r_e + \alpha^{-1} (\ln 2 + 3/2)$$

$$r_m^{(2)} = (13/7)^{1/6} r_e, \quad r_k^{(2)} = (91/72)(13/7)^{1/6} r_e$$

$$r_m^{(3)} = r_e + \frac{\ln m}{\alpha(m-1)}, \quad r_k^{(3)} = r_e + \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\ln m}{m-1} + \frac{m+1}{m} \right)$$

$$r_m^{(4)} = \left(\frac{n+1}{m+1} \right)^* r_e, \quad r_k^{(4)} = \left(\frac{m+n+1}{nm} + 1 \right) \left(\frac{n+1}{m+1} \right)^* r_e$$

$$E^{(1)} = 2D\alpha^2 r_e^{-1}, \quad \beta^{(1)} = 3 \quad (\alpha = 1/(n-m))$$

$$E^{(2)} = 72Dr_e^{-3}, \quad \beta^{(2)} = (133/144)(13/7)^{7/3} \approx 3,92$$

$$E^{(3)} = mD\alpha^2 r_e^{-1}, \quad \beta^{(3)} = 2^{-1} (m+1) m^*$$

$$E^{(4)} = nmDr_e^{-3}, \quad \beta^{(4)} = \frac{(m+n+1)(n+1)}{nm} \left(\frac{n+1}{m+1} \right)^{*(m+2)}$$

Задание сил сцепления (2.3) упрощенным соотношением весьма облегчает расчеты по формулам (2.1), (2.2). Из наличия радиуса обрезания r_k следует существование у концов трещины участков $l_0 \leq |x_1| \leq l$ длины $\Delta = l - l_0$, вне которых расстояние между берегами превышает r_k и, следовательно, силы сцепления отсутствуют (см. фиг. 4). С учетом этого формула (2.2) после преобразований

$\sigma/\sigma_m \setminus$	β		
	3	3,92	1
0,1	530	680	220
	440	570	160
	430	560	140
0,05	2120	2700	880
	1750	2270	640
	1700	2240	570
0,01	52900	67600	21900
	43600	56700	16000
	42600	55700	14200

$$\sigma_{22}(x_1, 0) = \sigma - \frac{2}{\pi} \frac{d}{dx_1} \left\{ \sigma \int_0^l u (x_1^2 - u^2)^{-1/2} \left[\int_0^u (u^2 - s^2)^{-1/2} ds \right] du - \right. \\ \left. - \sigma_m \int_{l_0}^l u (x_1^2 - u^2)^{-1/2} \left[\int_{l_0}^u (u^2 - s^2)^{-1/2} ds \right] du \right\}, \quad x_1 > l$$

Вычисление интегралов дает

$$\sigma_{22}(x_1, 0) = \sigma - \frac{2}{\pi} \frac{d}{dx_1} \left\{ \frac{\pi\sigma}{2} (x_1 - \sqrt{x_1^2 - l^2}) - \frac{\pi\sigma_m}{2} (x_1 - l_0) + \right. \\ \left. + \sigma_m \sqrt{x_1^2 - l^2} \arccos \frac{l_0}{l} - \sigma_m \left[l_0 \arcsin \left(\frac{x_1^2 - l^2}{x_1^2 - l_0^2} \right)^{1/2} - x_1 \arcsin \left(\frac{l_0}{l} \left(\frac{x_1^2 - l^2}{x_1^2 - l_0^2} \right)^{1/2} \right) \right] \right\} \\ \text{при } x_1 > l \quad (2.6)$$

Аналогичным образом выводятся формулы для раскрытия трещины $r(x_1)$. Ограничимся тем, что непосредственно из (2.1) вычислим частное значение $r(l_0)$. Будем иметь

$$r(l_0) = r_m + 8(1 - \nu^2)(\pi E)^{-1} \int_{l_0}^l u (u^2 - l_0^2)^{-1/2} \left[\sigma \int_0^u (u^2 - s^2)^{-1/2} ds - \right. \\ \left. - \sigma_m \int_{l_0}^u (u^2 - s^2)^{-1/2} ds \right] du = r_m + 8(1 - \nu^2)(\pi E)^{-1} \left\{ \frac{\pi\sigma}{2} (l^2 - l_0^2)^{1/2} - \right. \\ \left. - \sigma_m [(l^2 - l_0^2)^{1/2} \arccos(l_0/l) + l_0 \ln(l_0/l)] \right\}$$

откуда, пользуясь тем, что $r(l_0) = r_k$, в предположении $\Delta/l \ll 1$ (расчеты покажут, что $\Delta/r_e = O(1)$) получаем соотношение

$$r_k - r_m = 4(1 - \nu^2) E^{-1} (\sigma (2l\Delta)^{1/2} - (2/\pi) \sigma_m \Delta) \quad (2.7)$$

Согласно дискретному критерию хрупкой прочности Новожилова [2] для трещины, находящейся в критическом состоянии с длиной $2l_c$, напряжение, усредненное в пределах участка взаимодействия ближайшей (снаружи) к ее концу пары атомов, достигает максимальной величины σ_m , что в условиях плоской задачи означает

$$\frac{1}{r_e} \int_{l_c}^{l_c+r_e} \sigma_{22}(x_1, 0) dx_1 = \sigma_m \quad (2.8)$$

Подстановка в (2.8) формулы (2.6) дает в предположении $\Delta/l \ll 1, r_e/l \ll 1$ при $l = l_c$ ($a = \Delta/r_e$):

$$(\sigma/\sigma_m)(2l_c/r_e)^{1/2} = (2/\pi)[2a^{1/2} + (1+a) \arcsin((1+a)^{-1/2})] \quad (2.9)$$

В свою очередь соотношение (2.7) при $l = l_c$ может быть записано в виде

$$(\sigma/\sigma_m)(2l_c/r_e)^{1/2} = (2/\pi)[(r_k - r_m) \pi E (8(1 - \nu^2) r_e \sigma_m a^{1/2})^{-1} + a^{1/2}] \quad (2.10)$$

Сравнение (2.9) и (2.10) приводит к уравнению для определения параметра a :

$$a + a^{1/2} (1+a) \arcsin((1+a)^{-1/2}) = (\pi/4)(1 - \nu^2)^{-1/2} \beta \quad (2.11)$$

$$\beta = (r_k - r_m) E (2r_e \sigma_m)^{-1} = \gamma_1 E (r_e \sigma_m^2)^{-1}$$

где β — числовая постоянная из формулы (2.5), определяемая потенциалом взаимодействия $v(r)$. Из (2.11) следует, что длина участка действия сил сцепления $\Delta = ar_e$ не зависит от длины трещины и приложенных к телу напряжений. При $\nu = 1/3$ для потенциалов Морса $a \approx 1,04$, Леннард — Джонса $a \approx 1,43$.

Используя (2.11), перепишем (2.9) в виде

$$2(\sigma/\sigma_m)(2l_c/r_e)^{1/2} = (1 - \nu^2)^{-1/2} \beta a^{-1/2} + 4\pi^{-1} a^{1/2} \quad (2.12)$$

Зная потенциал взаимодействия, с помощью формулы (2.12) можно определить критическую величину растягивающего напряжения σ для трещины заданной длины $2l_c$ и, наоборот, критическую длину при заданном напряжении σ . В таблице представлены результаты расчетов критической длины трещины (выраженной в единицах межатомного расстояния r_e) при нескольких различных значениях отношения σ/σ_m и величины β . Первая строка рассчитана по формулам публикуемой работы, вторая — по формулам [2], третья соответствует гриффитсовской длине трещины, определяемой как $2l_g = 4E_1[\pi(1 - \nu^2)\sigma^2]^{-1}$. Коэффициент Пуассона брался равным $1/3$. Было учтено, что В. В. Новожилов рассматривал в [2] плоское напряженное состояние, поэтому его формулы были скорректированы применительно к состоянию плоской деформации. При этом формула (2.12) совпала с соответствующей ей формулой (7.5) из [2], различие сохранилось лишь в уравнениях, связывающих β и a (формулы (7.7) в [2] и (2.11)).

Расчеты в целом подтверждают сделанный в [2] вывод, что при напряжениях порядка предела прочности реальных твердых тел длины трещин оказываются меньше размеров зерен, т. е. теория равновесных трещин В. В. Новожилова [2] описывает механизм зарождения и распространения трещин в зернах поликристаллов. Вместе с тем существенным является выбор закона межатомного взаимодействия, от которого зависит величина ключевого параметра β . Так, заниженное по сравнению с реалистичными значение $\beta = 1$ дает в 3—4 раза меньшие критические длины трещины. Соответственно предельная нагрузка при заданной длине, вычисляемая с помощью (2.12), также оказывается в 1,7—2 раза меньшей. Можно показать, что подобное расхождение имеет место для всего указанного В. В. Новожиловым [2] диапазона изменения β ($0,5 < \beta < 1,3$). Это свидетельствует о необходимости использования реалистичных физических величин в задачах, учитывающих дискретность строения твердых тел, даже если при решении этих задач допускаются упрощения, подобные примененной выше частичной линеаризации исходного закона взаимодействия атомов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Новожилов В. В., Слепян Л. И. Некоторые проблемы и достижения механики разрушения//Вестник АН СССР. 1987. № 9. С. 96—111.
2. Новожилов В. В. К основам теории равновесных трещин в упругих телах//ПММ. 1969. Т. 33. Вып. 5. С. 797—812.
3. Макмиллан Н. Идеальная прочность твердых тел//Атомистика разрушения: Сб. статей 1983—1985 гг./Сост. А. Ю. Ишлинский. М.: Мир, 1987. С. 35—103.
4. Girifalco L. A., Weizer V. G. Applications of the Morse potential function to cubic metals//Phys. Rev. 1959. V. 114. No. 3. P. 687—690
5. Вайнберг М. М., Треногин В. А. Теория ветвления решений нелинейных уравнений. М.: Наука, 1969. 528 с.
6. Леонов М. Я., Панасюк В. В. Развитие мельчайших трещин в твердом теле//Прикладная механика. 1959. Т. 5. № 4. С. 391—401.
7. Панасюк В. В. Предельное равновесие хрупких тел с трещинами. Киев: Наукова думка, 1968. 246 с.
8. Гудьер Дж. Математическая теория равновесных трещин//Разрушение. Т. 2./Под. ред. Г. Либовица. М.: Мир. 1975. С. 13—82.
9. Chan D. Y. C., Hughes B. D., White L. R. A physically consistent theory of fracture in a brittle solid//J. Colloid and Interface Sci. 1987. V. 115. No. 1. P. 240—259.

Новосибирск

Поступила в редакцию
19.II.1991