

УДК 539.375

© 2000 г. В.М. КОРНЕВ, В.Д. КУРГУЗОВ

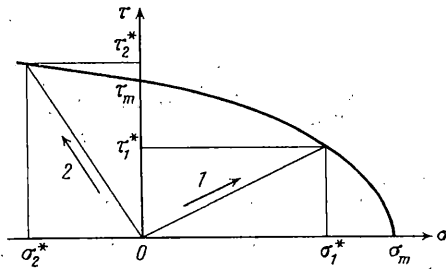
ДИСКРЕТНО-ИНТЕГРАЛЬНЫЙ КРИТЕРИЙ ПРОЧНОСТИ ДЛЯ СЛОЖНОГО НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ

Рассматривается плотноупакованный слой атомов, имеющий макротрещину и вакансии. Моделируется поведение атомной структуры в окрестности вершины трещины. Изучается потеря устойчивости трехатомной ячейки в плотноупакованном слое атомов при сложном напряженном состоянии. Обнаружена угловая точка, соответствующая бифуркации решений, из которой возможны два пути закритического деформирования трехатомной ячейки. Проведено сравнение полученных численных значений теоретических прочностей с существующими экспериментальными наблюдениями и с теоретическими оценками. Предложен дискретно-интегральный критерий прочности для сложного напряженно-деформированного состояния. В отличие от классических критериев предложенный критерий допускает предельный переход по параметру длина трещины и описывает как прочность трещиноватых тел, так и прочность тел без трещин.

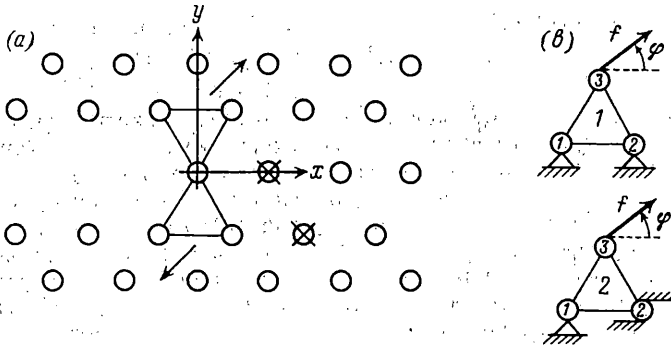
1. Введение. В исследованиях прочности и разрушения твердых тел придается все большее значение подходам, связанным с дискретностью строения материала. Рассматривая разрушение идеального кристаллического твердого тела с трещиной как дискретный процесс [1], В.В. Новожилов предложил для оценки прочности хрупкого упругого тела в окрестности сингулярных точек поля напряжений осреднять последние в пределах одного атома и сравнивать их с теоретической прочностью на разрыв. Реальные кристаллы содержат дефекты, самыми распространенными из которых являются вакансии. В работе [2] предложены дискретно-интегральные критерии для трех простейших типов трещин, причем пределы осреднения напряжений поставлены в зависимость от наличия, размеров и местоположения дефектов в окрестности носика трещины. Считается, что соответствующие осредненные напряжения не превосходят теоретических прочностей на разрыв или на сдвиг.

В этой статье предлагается дискретно-интегральный критерий прочности для сложного напряженного состояния. В критерий входят параметры, характеризующие теоретическую прочность кристаллической решетки. Рассматриваются монокристаллы с трещиной, в окрестности носика которой имеются дефекты типа вакансий. Кривая теоретической прочности для сложного напряженного состояния определяется из решения задачи о деформировании и потери устойчивости трехатомной ячейки. Эта кривая для простейшего случая напоминает огибающую кругов Мора для разных напряженных состояний [3]. Предложенный критерий описывает хрупкие и квазихрупкие разрушения и частично описывает пластическое разрушение.

2. Механическая модель, критерий локального разрушения в вершине трещины при пропорциональном нагружении. Изучается поведение под нагрузкой тела, имеющего макротрещину. Пусть плоская макротрещина с прямолинейным фронтом не нарушает в макрообъеме структуру монокристалла [4]. Вообще говоря, не все четырнадцать решеток Браве при соответствующей ориентации допускают наличие плоской трещины с прямолинейным фронтом.



Фиг. 1



Фиг. 2

Для выбранных пропорциональных путей нагружения, указанных стрелками 1 или 2 на фиг. 1, имеем $a = \text{const}$ в соотношении

$$\tau = a\sigma \quad (2.1)$$

где τ – сдвигающие напряжения, σ – нормальные напряжения. Допустим, что при сложном напряженном состоянии получена предельная кривая, описывающая теоретическую прочность твердого тела, такая что в пределе при $a \rightarrow 0$ или $a \rightarrow \infty$ имеем теоретические прочности твердых тел на сдвиг τ_m и на разрыв σ_m [5]. Введем обозначения τ^* , σ^* для критических состояний, см. фиг. 1, итак, величины τ^* и σ^* описывают теоретическую прочность тела для выбранных путей нагружения: для первого пути нагружения имеем τ_1^* и σ_1^* , для второго пути нагружения имеем τ_2^* и σ_2^* , причем для последнего пути нагружения $\sigma_2^* < 0$, а $\tau_2^* > \tau_m$.

Рассматривается плотноупакованный слой атомов, имеющий макротрещину и вакансии; пример такого слоя приведен на фиг. 2, *a*: считается, что при образовании макротрещины частично убран ряд атомов, а непосредственно перед вершиной имеются вакансии, отмеченные крестиком.

На фиг. 2, *b* дана схематизация деформирования трехатомной ячейки. Изучается наислабейший слой атомов, расположенный перпендикулярно прямому фронту плоской острой макротрещины длиной $2l$. Вводится в рассмотрение дискретно-интегральный критерий квазихрупкой прочности подрастания трещин (трещина моделируется двусторонним разрезом):

$$\frac{1}{kr_e} \int_0^{nr_e} \sigma_y(x, 0) dx \leq \sigma^*, \quad \frac{1}{kr_e} \int_0^{nr_e} \tau_{xy}(x, 0) dx \leq \tau^* \quad (2.2)$$

Здесь σ_y и τ_{xy} – нормальные и сдвигающие напряжения в вершине трещины (они

имеют особенности), Oxy – прямоугольная система координат, начало которой расположено в правом кончике трещины; r_e – расстояние между центрами атомов; n и k – числа, причем $n \geq k$ (k – число действующих межатомных связей); nr_e – интервал осреднения. Пределы осреднения напряжений в этом критерии поставлены в зависимости от наличия, размера и местоположения дефекта кристаллической решетки в окрестности носика трещины; в изображенном на фиг. 2, а случае имеем $n = 2$; $k = 1$. Величина этих осредненных напряжений не должна превосходить соответствующую теоретическую прочность, определяемую величинами τ^* и σ^* . Далее в рассуждениях существенно используется предположение о том, что в процессе деформирования между берегами трещины остается зазор $2r_e$, а потому какими-либо взаимодействиями между берегами трещины можно пренебречь. Предлагаемый критерий допускает переход к рассмотрению трещин нормального отрыва и поперечного сдвига [2]. Подчеркнем, что в отличие от работы [1] здесь, как и в работе [2], при построении решений в окрестности кончика трещины отсутствует нагруженный участок разреза. Таким образом критерий (2.2) при $a = 0$ соответствует необходимому критерию хрупкой прочности В.В. Новожилова.

Если воспользоваться представлениями решений для напряжений на продолжении острой трещины $y = 0$ через КИН (коэффициенты интенсивности напряжений) K_I , K_{II} , то можно записать в окрестности кончика трещины для линейной задачи

$$\sigma_y(x, 0) = \sigma_\infty + \frac{K_I}{\sqrt{2\pi x}}, \quad \tau_{xy}(x, 0) = \tau_\infty + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi x}}$$

где σ_∞ , τ_∞ – характерные напряжения, заданные на бесконечности, либо на каком-то контуре ограниченного тела. Используя последнее представление решения, можно преобразовать (2.2). Имеют место оценки КИН K_I^0 , K_{II}^0 острой трещины (см. соотношение (1.4) в [2]):

$$\frac{K_I^0}{\sigma_\infty} \leq \left(\frac{k\sigma^*}{n\sigma_\infty} - 1 \right) \sqrt{\frac{\pi nr_e}{2}}, \quad \frac{K_{II}^0}{\tau_\infty} \leq \left(\frac{k\tau^*}{n\tau_\infty} - 1 \right) \sqrt{\frac{\pi nr_e}{2}} \quad (2.3)$$

Так как критические КИН K_I^{*0} , K_{II}^{*0} суть верхние грани соответствующих множеств K_I^0 , K_{II}^0 , то полученная система неравенств (2.3) в предельном случае очевидным образом сводится к одному соотношению

$$\frac{K_I^{*0}}{\sigma_\infty} = \left(\frac{\sigma^* k}{\sigma_\infty n} - 1 \right) \sqrt{\frac{\pi nr_e}{2}} \quad (2.4)$$

поскольку из-за линейности задачи имеем (см. (2.1)) $\tau_\infty = a\sigma_\infty$, $\tau^* = a\sigma^* K_{II}^{*0} = aK_I^{*0}$.

Для трещины Гриффитса критическая длина $2l_{nk}^*$ острой трещины определяется одним из соотношений

$$\frac{2l_{nk}^*}{r_e} = \left(\frac{\sigma^*}{\sigma_\infty} \frac{n}{k} - 1 \right) \frac{k^2}{n}, \quad \frac{2l_{nk}^*}{r_e} = \left(\frac{\tau^*}{\tau_\infty} \frac{n}{k} - 1 \right) \frac{k^2}{n} \quad (2.5)$$

если принять во внимание, что $K_I^{*0} = \sigma_\infty \sqrt{\pi l_{nk}^*}$, $K_{II}^{*0} = \tau_\infty \sqrt{\pi l_{nk}^*}$. Очевидно, что каждое из соотношений (2.5) переходит в другое, см. (2.1).

Обратим внимание на структуру двух последних соотношений (2.4), (2.5) для критических параметров: в принципе они допускают предельный переход при $K_I^{*0} \rightarrow 0$, $2l_{nk}^* \rightarrow 0$ (в классических соотношениях подобный предельный переход отсутствует).

3. Оценки прочности трехатомной ячейки. Моделируется поведение атомной структуры в окрестности вершины трещины. Изучается потеря устойчивости трехатомной ячейки в плотноупакованном слое атомов при сложном напряженном состоянии. Рассмотрим деформирование трехатомной ячейки, изображенной на фиг. 2, *b*. Конфигурация 1 моделирует поведение трехатомной ячейки в вершине трещины (фиг. 2, *a*) при наличии только одной вакансии перед вершиной трещины; конфигурация 2 моделирует поведение трехатомной ячейки в вершине трещины, когда имеются две вакансии, помеченных на фиг. 2, *a* крестами. В конфигурации 1 атом 2 закреплен, а в конфигурации 2 атом 2 может смещаться в направлении горизонтальной оси. Внешнее воздействие характеризуется силой f , приложенной к третьему атому ячейки и направленной под углом φ к горизонтальной оси. Действие межатомных сил предполагается центральным с потенциалом взаимодействия Леннарда – Джонса [5]:

$$U(r) = D \left[\left(r_e / r \right)^{12} - \left(r_e / r \right)^6 \right]$$

или Морзе [5]:

$$U(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2e^{-\alpha(r-r_e)} \right]$$

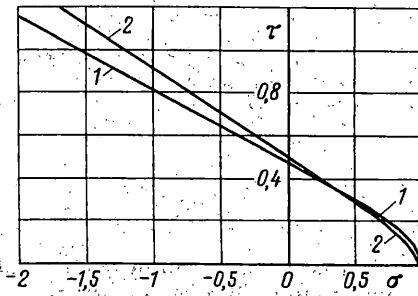
где r – расстояние между атомами, r_e – положение равновесия, D , α – константы. При $r = r_e$ (равновесное состояние) центральная сила взаимодействия атомов равна нулю; при $r < r_e$ между атомами действует сила отталкивания (отрицательная); при $r > r_e$ между атомами действует сила притяжения (положительная), которая достигает максимума f_m на некотором расстоянии r_m , так что при дальнейшем удалении атомов центральная сила их взаимодействия ослабевает и на расстоянии $2r_e$ падает на порядок от ее максимального значения.

Для решения нелинейной задачи по деформированию атомной ячейки используется пошаговая процедура [6]. Решения подобных задач содержат собственные состояния типа максимальной нагрузки. Основная трудность решения таких задач состоит в том, что в качестве монотонно возрастающего параметра деформирования нельзя взять внешнюю силу, действующую на атомную решетку. Второй особенностью, осложняющей решение задачи, является вырожденность касательной матрицы жесткости при достижении максимальной нагрузки. В этом случае итерационные процедуры не дают сходимости к решению задачи. Имеется ряд приемов, с помощью которых обходятся упомянутые выше трудности [6]. Например, можно ввести параметр внешней силы в число неизвестных величин (наряду с перемещениями), а в качестве дополнительного уравнения задавать длину дуги в (U, λ) -пространстве (U – вектор смещений, λ – параметр внешней силы). В численных расчетах использовался метод Крисфилда с движением вектора неизвестных по сфере в (U, λ) -пространстве [7, 8].

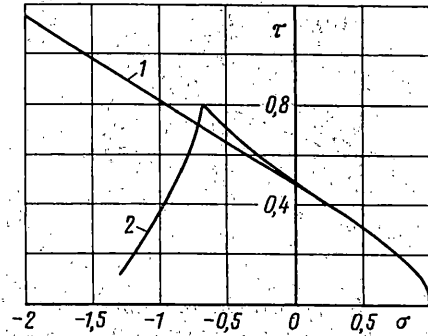
Угол наклона внешней силы φ варьировался в диапазоне от -60° до 90° , значения констант потенциалов межатомных взаимодействий брались следующими: $r_e = 3$, $D = 0,3$, $\alpha = 1, 4$.

На фиг. 3–6 по осям σ – τ отложены нормальная (в направлении Oy) и касательная (в направлении Ox) составляющие максимальной нагрузки f_m при различных значениях угла наклона φ ($\sigma = 0$ при $\varphi = 0^\circ$, $\tau = 0$ при $\varphi = 90^\circ$, отрицательным значениям σ соответствуют значения φ в диапазоне от 0° до -60°). Кривые 1 и 2 на фиг. 3–6 нормированы наибольшим значением σ (своим для каждой кривой) так, что $\sigma_m^{(1)} = \sigma_m^{(2)} = 1$. Нормальная и касательная составляющие максимальной нагрузки f_m соответствуют значениям $kr_e\sigma^*$ и $kr_e\tau^*$ в формулах (2.2).

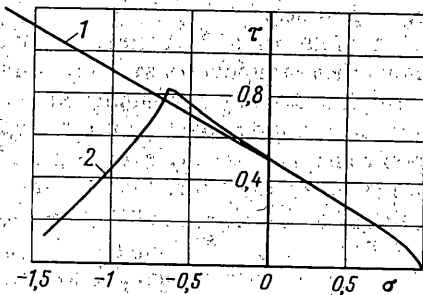
На фиг. 3 представлена зависимость τ – σ в случае трехатомной ячейки типа 1 (фиг. 2, *b*) для потенциала Морзе (кривая 1) и потенциала Леннарда – Джонса (кривая 2). Полученные кривые охватывают весь диапазон разрушения твердых тел от



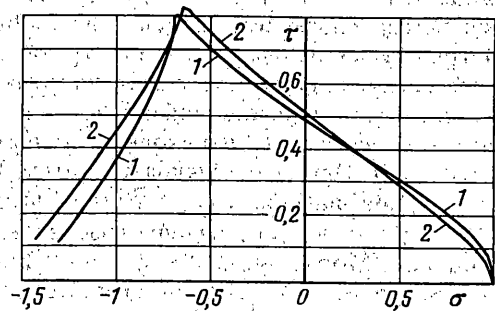
Фиг. 3



Фиг. 4



Фиг. 5

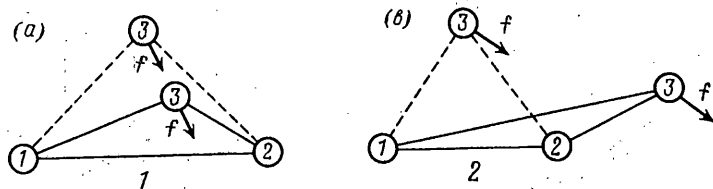


Фиг. 6

хрупкого и квазихрупкого ($\sigma > 0$) до разрушения в пластической области ($\sigma < 0$) и хорошо согласуются с огибающей предельных кругов Мора для разных напряженных состояний в [3, стр. 658]. Заметим, что полученные кривые и классическая кривая в [3, стр. 658] выпуклы и не имеют угловых точек.

Качественно кривые 1, 2 на фиг. 3 подобны диаграммам предельных соотношений 1, 3, 4, 9, рассчитанным по различным критериям прочности при сложных напряженных состояниях (рис. 3.26 на стр. 106 справочника [9]). Значения $\tau_m^{(1)} = 0,48$, $\tau_m^{(2)} = 0,51$ существенно ниже значений τ_m для кривых 1, 3, 4, 9 в [9], которые лежат в диапазоне от 0,8 до 1, но близки к значениям τ_m из интервала 0,42–0,61. Предельные кривые 1–9 на рис. 3.26 [9] получены по различным вариантам применения первой гипотезы прочности в сопротивлении материалов (табл. 3.1 на стр. 107–108 [9]). Отметим, что кривые 1, 2 на фиг. 3 дают нижнюю границу предельных значений, описываемых кривыми 1, 3, 4, 6–9 [9, стр. 106], когда $\sigma = 0$.

На фиг. 4 представлена зависимость τ – σ для потенциала Морзе для трехатомных ячеек типа 1 (кривая 1) и типа 2 (кривая 2); на фиг. 5 представлена зависимость τ – σ для потенциала Леннард–Джонса для трехатомных ячеек типа 1 (кривая 1) и типа 2 (кривая 2). Заметим, что деформирование трехатомных ячеек, соответствующее квазихрупкому разрушению (участок $\sigma > 0$ диаграмм τ – σ на фиг. 4, 5), не зависит от схемы закрепления второго атома. Появление ниспадающего участка на кривых 1, 2 при $\sigma < -0,6$ качественно согласуется с поведением кривых 2, 6, 7 на рис. 3.26 [9, стр. 106]. Резкое падение диаграмм 2 на фиг. 4, 5 (график становится выпуклым вниз) левее угловой точки обнаруживает сверхчувствительность атомной решетки к появлению вакансий. Одно из проявлений такого эффекта – ковка металла при повышенной температуре, когда резко возрастает вероятность появления вакансий, кроме того, уменьшение модулей упругости с ростом температуры облегчает деформирование металла.



Фиг. 7

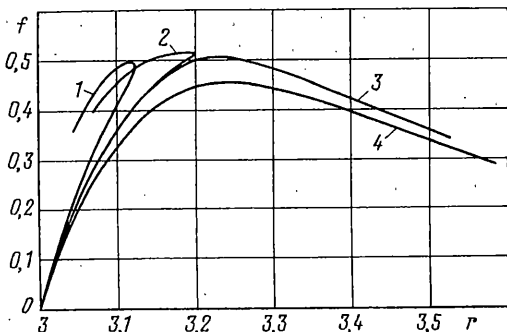
На фиг. 6 представлена зависимость $\tau - \sigma$ в случае трехатомной ячейки типа 2 (фиг. 2, *b*) для потенциала Морзе (кривая 1) и потенциала Леннард – Джонса (кривая 2). Сравнение двух потенциалов показывает, что потенциал Морзе, обычно применяемый для металлов, дает меньшие значения предельных касательных напряжений, чем дальнедействующий потенциал Леннард – Джонса.

Острый угол на графиках для трехатомной ячейки типа 2 свидетельствует о существовании критического значения угла φ^* , при котором происходит бифуркация решений: закритическое деформирование возможно по двум конфигурациям, показанным на фиг. 7 (штриховыми линиями показана докритическая конфигурация системы). При значениях $\varphi < \varphi^*$ атом 3 "проваливается" между атомами 1 и 2 (фиг. 7, *a*), при значениях $\varphi > \varphi^*$ атом 3 "заваливается" за атом 2 (фиг. 7, *b*). В численных расчетах были установлены диапазоны, содержащие критический угол φ^* : для потенциала Морзе $-40,23^\circ < \varphi^* < -40,11^\circ$, для потенциала Леннард – Джонса $-37,41^\circ < \varphi^* < -37,29^\circ$. Точные значения найти не удалось в силу непреодолимых вычислительных трудностей, возникающих при приближении к критическому значению. Остался невыясненным вопрос, является ли устойчивым "симметричное" решение, занимающее промежуточное положение между конфигурациями 1 и 2 (фиг. 7).

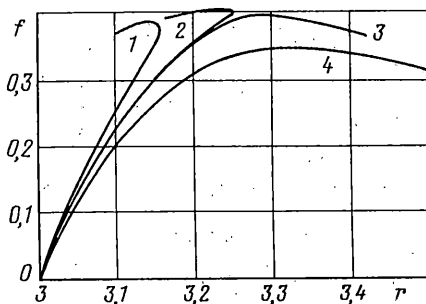
На фиг. 8 показана зависимость внешней силы f от расстояния между 1-м и 3-м атомами в трехатомной ячейке типа 2 (фиг. 2, *b*) для потенциала Леннард – Джонса. Кривые 1 и 2 соответствуют закритическому поведению 1-го типа (фиг. 7, *a*), кривые 3 и 4 соответствуют закритическому поведению 2-го типа (фиг. 7, *b*). Конкретные значения угла φ , соответствующие нарисованным кривым: кривая 1 – $\varphi = -40^\circ$; кривая 2 – $\varphi = -37,41^\circ$; кривая 3 – $\varphi = -37,29^\circ$; кривая 4 – $\varphi = -35^\circ$.

На фиг. 9 показана зависимость внешней силы f от расстояния между 1-м и 3-м атомами в трехатомной ячейке типа 2 (фиг. 2, *b*) для потенциала Морзе. Кривые 1 и 2 соответствуют закритическому поведению 1-го типа (фиг. 7, *a*), кривые 3 и 4 соответствуют закритическому поведению 2-го типа (фиг. 7, *b*). Конкретные значения угла φ , соответствующие нарисованным кривым: кривая 1 – $\varphi = -42,5^\circ$; кривая 2 – $\varphi = -40,23^\circ$; кривая 3 – $\varphi = -40,11^\circ$; кривая 4 – $\varphi = -37,5^\circ$.

4. Обсуждение. Макмиллан [5, последний абзац] отмечает, что расчеты идеальных прочностей, делавшиеся в предположении однородности деформации, строго говоря, не могут быть применены к таким задачам о неоднородной деформации, в которых напряжения и деформации значительно меняются на расстояниях, сравнимых с областью действия межатомных сил, например, в случае вершины трещины, ядра дислокации или поверхности раздела частица – матрица. Расчеты теоретической прочности трехатомной ячейки предыдущего раздела учитывают сложное напряженное состояние в окрестности вершины трещины. Ввиду появления больших смещений и поворотов, физически нелинейная задача деформирования трехатомной ячейки становится еще и геометрически нелинейной. Существенная нелинейность поведения системы из трех атомов приводит к тому, что незначительное изменение условий закрепления вызывает резкое падение предельной прочности (угловая точка на фиг. 4, 5). Принимая во внимание оценки теоретической прочности твердых тел на сдвиг τ_m и



Фиг. 8



Фиг. 9

на разрыв σ_m , приведенные в [5], $\mu/30 < \tau_m < \mu/10$; $0,1E < \sigma_m < 0,2E$, находим

$$0,1 < \tau_m/\sigma_m < 0,4 \quad (4.1)$$

Полученное в расчетах значение $\tau_m/\sigma_m = 0,48$ не противоречит оценке (4.1). Даже такая грубая механическая модель – трехатомная ячейка (фиг. 2, b) – позволяет получить значения теоретической прочности, близкие к эмпирическим оценкам в [5]. Выше рассматривалось разрушение наислабейшего слоя атомов. Реальное разрушение происходит в материалах выбрасыванием вперед перегибов [10] или языков [11] с последующим добиванием недоразрушенного материала [11, 12]; ломаный фронт трещины имеет тенденцию к превращению в прямолинейный.

5. Заключение. В статье моделировалось поведение атомной структуры в окрестности вершины трещины в плотноупакованном слое атомов. Изучалось деформирование трехатомной ячейки при сложном напряженном состоянии. Получены предельные зависимости $\tau - \sigma$ для двух потенциалов межатомных взаимодействий и для двух типов трехатомных ячеек, моделирующих поведение трещин с одной и двумя вакансиями перед ее вершиной. Обнаружена угловая точка, соответствующая бифуркации решений, из которой возможны два пути заkritического деформирования трехатомной ячейки. Численные значения полученных теоретических прочностей τ_m и σ_m сравнивались с существующими экспериментальными наблюдениями и с теоретическими оценками. Предложен дискретно-интегральный критерий прочности для сложного напряженно-деформированного состояния. В отличие от классических критериев предложенный критерий допускает предельный переход по параметру длина трещины и описывает как прочность трещиноватых тел, так и прочность тел без трещин.

Авторы благодарят С.Н. Коробейникова за полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 98-01-00692).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Новожилов В.В. О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // ПММ. 1969. Т. 33. Вып. 2. С. 212–222.
2. Корнев В.М. Интегральные критерии хрупкой прочности трещиноватых тел с дефектами при наличии вакансий в носике трещины. Прочность компактированных тел типа керамик // ПМТФ. 1996. Т. 37. № 5. С. 168–177.
3. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. М.: Наука, 1988. 712 с.
4. Шмитт-Томас К.Г. Металловедение для машиностроения. М.: Металлургия, 1995. 512 с.
5. Макмиллан Н. Идеальная прочность твердых тел // Атомистика разрушения. М.: Мир, 1987. С. 35–103.

6. *Коробейников С.Н.* Применение метода конечных элементов к решению нелинейных задач по деформированию и потере устойчивости атомных решеток: Препринт № 1–97. Новосибирск: Ин-т гидродинамики СО РАН, 1997. 33 с.
7. *Bathe K.-J., Dvorkin E.N.* On the automatic solution of nonlinear finite element equations // *Comput. and Struct.* 1983. V. 17. No. 5/6. P. 871–879.
8. *Sokol T., Witkowski M.* The equilibrium path determination in nonlinear analysis of structures // *Advances in Non-linear Finite Element Methods: Proc. 2nd Intern. Conf. on Computational Structures Technology* / Eds. M. Papadrakakis, B.H.V. Topping. Edinburgh: Civil-Comp Press, 1994, pp. 35–45.
9. Механика разрушения и прочность материалов. Справ. пособие / Под ред. В.В. Панасюка. Т. 1. Основы механики разрушения. Киев: Наук. думка, 1988. 487 с.
10. *Markworth A.J., Hirth J.P.* An atomistic model of crack extension by kink propagation // *J. Mater. Sci.* 1981. V. 16. No. 12. P. 3405–3417.
11. *Владимиров В.И., Карпинский Д.Н., Орлов А.Н.* Теория роста трещины в материале с крупными неоднородностями // *Физика металлов и металловедение.* 1975. Т. 39. Вып. 5. С. 952–959.
12. *Корнев В.М.* Интегральные критерии хрупкой прочности трещиноватых тел при наличии дефектов атомной структуры // *Тр. 9-й Конф. по прочности и пластичности.* М.: ИПМ РАН, 1996. Т. 1. С. 99–104.

Новосибирск

Поступила в редакцию
21.12.1998