

УДК 539.375

© 2003 г. Р.В. ГОЛЬДШТЕЙН, Г.А. ШАТАЛОВ

ХРУПКОЕ РАЗРУШЕНИЕ В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ АТОМИСТИЧЕСКОЙ ТРЕЩИНЫ

Рассмотрена атомная модель трещины Томсоновского типа. Предполагается, что краевая трещина разделяет две полубесконечные цепочки атомов. Взаимодействие между атомами соседних цепочек моделируется билинейными связями (пружинами), работающими на растяжение. Взаимодействие атомов в пределах каждой цепочки характеризуется пружинами, имеющими жесткость на изгиб. Растягивающие силы приложены к крайним атомам цепочек. Предполагается, что подготовка разрушения происходит вблизи вершины трещины в концевой зоне неизвестной длины, содержащей нелинейно деформированные связи. Посредством численно-аналитического моделирования получены оценки длины зоны сцепления в зависимости от длины трещины и параметров связей. Обсуждаются условия решеточного захвата.

1. Введение. Сопротивление материала росту трещин (трещиностойкость) определяется механизмами деформирования и разрушения, присущими материалу на различных уровнях его структуры и текстуры. Часто (например при хрупком и квазихрупком разрушении, при разрушении по границам соединения слоистых систем и систем с покрытиями) процессы подготовки разрушения вблизи края трещины сконцентрированы в тонкой концевой области. Для оценки трещиностойкости в таких случаях, начиная с работ [1, 2, 3], используют модели, в которых в явной форме вводится концевая область, где предполагается действие тех или иных связей (сил сцепления) между поверхностями трещины (см., например [4, 5] и указанные там публикации). Соответственно концевую область называют еще областью сцепления ("cohesion zone"). Силы сцепления могут соответствовать реально действующему механизму взаимодействия (например, межатомного) или отражать его эффективно.

Эти модели получили название моделей когезионного типа ("cohesive type models"). В модели Г.И. Баренблатта [1] размер зоны действия сил сцепления (концевой области трещины) считается малым по сравнению с длиной трещины и не меняющимся по мере роста трещины. Постоянен размер концевой области в модели Дагдейла [2].

В более общих моделях трещин когезионного типа, где учитывается нелинейный закон деформирования связей в концевой области, ее размер может меняться при увеличении длины трещины (см., например [4, 5]), хотя по-прежнему (как и в [1–3]) считается, что концевая область трещины тонкая.

Подобная ситуация характерна, в частности, для дискретных атомных моделей разрушения и трещин, в которых возможны лишь силы сцепления, соответствующие межатомному взаимодействию.

В последнее время эти модели вновь приобрели актуальность, в частности в связи с развитием высоких технологий, позволяющих получать слоистые системы с толщиной слоев порядка межатомного расстояния.

Решеточные модели важны для понимания процесса разрушения, позволяют прояснить ряд его существенных закономерностей. В рамках решеточных моделей можно

получить оценку размера концевой области трещины при атомном механизме разрушения.

Учет дискретности решетки (и следовательно процесса разрушения), а также нелинейного характера взаимодействия атомов приводит к тому, что как при увеличении длины трещины, так и при уменьшении ее длины (ее залечивании) необходимо преодолевать энергетический барьер. Это явление получило название решеточного захвата ("lattice trapping") [6–8]. Вследствие решеточного захвата в решеточных моделях определенной нагрузке может отвечать конечный интервал длин равновесных трещин [6–8]. В [6] в одномерной решетке рассматривалась трещина нормального отрыва, а в [9] – трещина продольного сдвига. В [7] обе решеточные модели рассмотрены одновременно и само явление решеточного захвата анализируется более подробно.

Существование диапазона равновесных длин было установлено несколько ранее В.В. Новожиловым [10, 11]. Его работы, хотя и выполнены в рамках континуума, также учитывали нелинейный закон межатомного взаимодействия в вершине трещины. При этом трещина рассматривалась не "как дефект, заранее существующий в решетке, а как нетривиальная форма равновесной деформации упругого тела, которая становится возможной только при наличии растягивающей тело нагрузки" [10].

Мерой решеточного захвата было предложено [6] считать функцию R , представляющую отношение максимального напряжения σ_+ , при котором рвется межатомная связь с номером n , к минимальному напряжению σ_- , при котором разорванная межатомная связь с номером $n + 1$ восстанавливается. В работе [7] явление решеточного захвата было качественно обосновано для произвольного вида нелинейной силы межатомного взаимодействия в том случае, если в зоне сцепления находится одна нелинейная связь. Однако не факт, что такая ситуация всегда имеет место. Для описания процесса хрупкого разрушения очень важно знать, сколько нелинейных связей находится в зоне сцепления, как меняется их число, если вообще меняется, по мере роста трещины. Наконец, хотелось бы знать, как рассчитывать функцию R и зависит ли она от длины трещины.

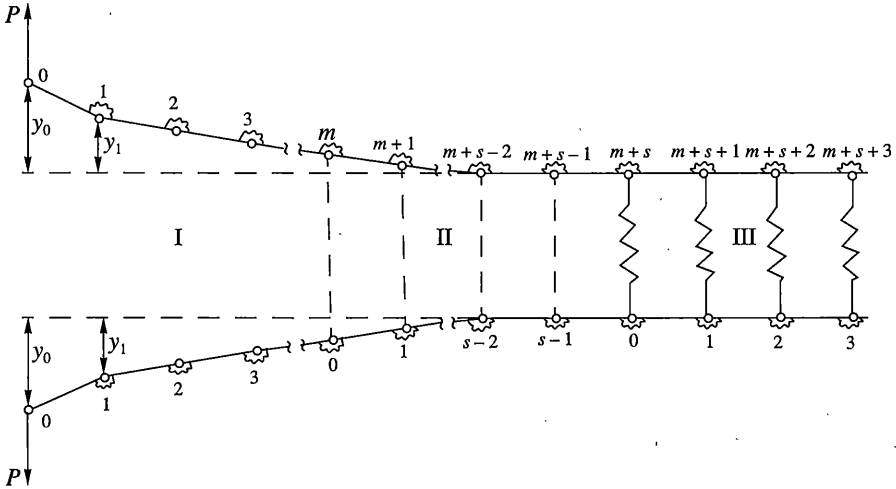
Целью настоящей статьи является попытка ответа на эти вопросы. При этом пристальное внимание уделено элементарному акту разрушения – разрыву межатомной связи. Следуя В.В. Новожилову, будем рассматривать трещину как "нетривиальную форму равновесной деформации упругого тела", возникающую под действием внешних нагрузок. Обратимый рост трещины рассматривается как переход от одного равновесного состояния к другому, каждому из которых отвечает своя равновесная нагрузка. Такие механизмы роста трещины как термофлуктуационный или туннелирование не рассматриваются.

Отметим, что обзор различных решеточных моделей, используемых в механике разрушения, можно найти в [7, 8, 12, 13].

2. Модель трещины. Вывод и решения уравнений равновесия. Модель одномерной решеточной трещины представляет собой две полубесконечные цепочки периодически расположенных атомов (фиг. 1).

Взаимодействие между атомами одной цепочки моделируется с помощью недеформируемых стержней, соединенных шарнирно. Между стержнями имеются изгибные пружины, недеформированные в исходном состоянии. Взаимодействие между атомами разных цепочек моделируется пружинами сцепления, работающими на растяжение–сжатие. Пружины сцепления являются, вообще говоря, нелинейными.

Под действием внешних сил P , приложенных к крайним атомам, последние испытывают вертикальные смещения y_0 . Смещения атома с номером j обозначим через y_j . Все смещения y_j строго вертикальны (отклонение от вертикали означает выход за рамки линейной теории упругости). На фиг. 1 на верхней цепочке показана сквозная



Фиг. 1

нумерация, а на нижней цепочке показана нумерация в пределах областей, на которые разделен кристалл с трещиной.

Кристалл с трещиной содержит три области. Область I – это область раскрытой трещины, где полностью отсутствуют пружины сцепления. Область II, содержащая произвольное число s связей сцепления и представляющая собой зону сцепления. Пружины сцепления в этой области показаны пунктиром. Области I и II принадлежат трещине. Область III содержит деформированный кристалл. В этой области деформация пружин линейно-упругая.

Качественно силы сцепления в зависимости от смещения y_j имеют вид, изображенный на фиг. 2. Для этих сил используется билинейное приближение, которое описывается формулой

$$f_j = \begin{cases} \beta y_j, & y_j \leq u_0 \\ \frac{\beta}{\eta - 1} (y_j - \eta u_0), & u_0 \leq y_j \leq \eta u_0 \\ 0, & y_j \geq \eta u_0 \end{cases} \quad (2.1)$$

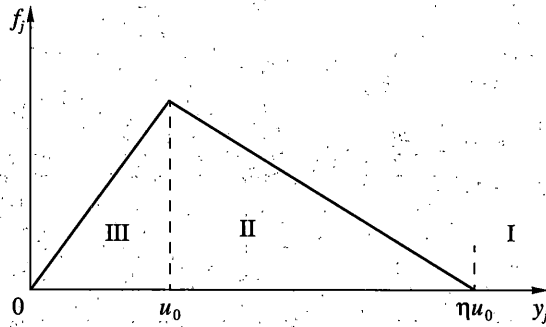
Здесь β – силовая постоянная, характеризующая сцепление, или жесткость пружины сцепления. Постоянная η – произвольное число, позволяющее менять наклон нисходящей ветви на фиг. 2. Первая строчка (2.1) описывает сцепление в области III, вторая – в области II, а третья – в области I.

Следует отметить, что описанная модель идентична модели Томсона [6] с одним, но существенным отличием. В предлагаемой модели зона сцепления содержит произвольное число связей.

Уравнения для определения смещений y_j представляют собой уравнения равновесия

$$f_j = -\partial w / \partial y_j = 0 \quad (2.2)$$

где w – энергия нагруженного тела с трещиной. Она содержит три вклада: работа внешних сил $A = -2Py_0$; w_e – упругая энергия пружин и w_s – поверхностная энергия тре-



Фиг. 2

щины, которая по определению равна работе по разрыву сил взаимодействия между двумя поверхностями. Поскольку w_s не зависит от y_j , то она не учитывается при выводе (2.2).

Энергию тела с трещиной можно записать в виде

$$w = -2Py_0 + \gamma \sum_{j=1}^{\infty} (y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1})^2 + 2\beta \sum_{j=m}^{m+s-1} (y_j - u_0) \left[u_0 - \frac{y_j - \eta u_0}{\eta - 1} \right] + 2\beta \sum_{j=m+s}^{\infty} y_j^2 \quad (2.3)$$

где γ – изгибная жесткость.

Дифференцируя (2.1) по y_j , получим область I

$$y_{j-2} - 4y_{j-1} + 6y_j - 4y_{j+1} + y_{j+2} = 0 \quad (j = 2, 3, \dots, m-1) \quad (2.4)$$

Уравнения для $j = 0, 1$ требуют дополнительного рассмотрения. Не вдаваясь в подробности, выпишем эти уравнения

$$2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3 = 0 \quad (j = 1) \quad (2.5)$$

$$P/\gamma - y_0 + 2y_1 - y_2 = 0 \quad (j = 0) \quad (2.6)$$

область II

$$y_{j-2} - 4y_{j-1} + 6y_j - 4y_{j+1} + y_{j+2} - \frac{2a}{\eta - 1} (y_j - \eta u_0) = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, s-1) \quad (2.7)$$

область III

$$y_{j-2} - 4y_{j-1} + 6y_j - 4y_{j+1} + y_{j+2} + 2ay_j = 0, \quad a = \beta/\gamma \quad (j = 0, 1, \dots) \quad (2.8)$$

Полученные уравнения принадлежат к классу уравнений в конечных разностях. Их решение ищется в виде [14]:

$$y_j = C\lambda^j \quad (2.9)$$

где C – постоянная. Подставив (2.9) в (2.4), получим характеристическое уравнение для области I

$$(\lambda - 1)^4 = 0 \quad (2.10)$$

имеющее один 4-х кратный корень. Для кратных корней решение записывается так [14]:

$$y_j = C_0 + C_1j + C_2j^2 + C_3j^3 \quad (2.11)$$

Записав (2.11) для номеров $j = 0, 1, 2, 3$ и присоединив к полученным уравнениям уравнения (2.5) и (2.6), можно определить постоянные C_j ($j = 0, 1, 2, 3$) через y_0 и $y_1 - y_0$. Тогда решение в области I будет

$$y_j = 1/6(P/\gamma)(j^3 - j) + (y_1 - y_0)j + y_0 \quad (2.12)$$

Уравнение (2.7) для области II является неоднородным. Полагая

$$y_j = \tilde{y}_j + B \quad (2.13)$$

где B – постоянная, и подставляя (2.13) в (2.7), найдем

$$\tilde{y}_{j-2} - 4\tilde{y}_{j-1} + 6\tilde{y}_j - 4\tilde{y}_{j+1} + \tilde{y}_{j+2} - \frac{2a}{\eta - 1}\tilde{y}_j = 0, \quad B = \eta u_0 \quad (2.14)$$

Характеристическое уравнение для (2.14) будет

$$\lambda^4 - 4\lambda^3 + \left(6 - \frac{a}{\eta - 1}\right)\lambda^2 - 4\lambda + 1 = 0 \quad (2.15)$$

а его решение имеет вид

$$\lambda_{1,2} = 1 + \rho\alpha \pm (\rho^2\alpha^2 + 2\rho\alpha)^{1/2}, \quad \lambda_{3,4} = 1 - \rho\alpha \pm (\rho^2\alpha^2 - 2\rho\alpha)^{1/2} \quad (2.16)$$

$$\rho = (\eta - 1)^{-1/2}, \quad \alpha = \frac{1}{2}\sqrt{2a} \quad (2.17)$$

Таким образом, решение уравнения (2.7) будет

$$y_j = C_1\lambda_1^j + C_2\lambda_2^j + C_3\lambda_3^j + C_4\lambda_4^j + \eta u_0 \quad (2.18)$$

Характеристическое уравнение для области III запишется так

$$\lambda^4 - 4\lambda^3 + (6 + 2a)\lambda^2 - 4\lambda + 1 = 0 \quad (2.19)$$

Все корни этого уравнения комплексны. При этом имеют место соотношения

$$\lambda_1 = re^{-i\varphi} \quad (r < 1), \quad \lambda_2 = \lambda_1^{-1} = r^{-1}e^{i\varphi} \quad (2.20)$$

$$\lambda_3 = \lambda_1^*, \quad \lambda_4 = \lambda_2^*$$

Параметры r и φ не являются независимыми, поскольку они выражаются через основной параметр теории α (см. (2.17)), представляющий собой некоторую функцию от отношения жесткости сцепления к изгибной жесткости. Между r и φ имеют место соотношения

$$r + r^{-1} = \frac{2}{\cos \varphi}, \quad r^{-1} - r = \frac{2\alpha}{\sin \varphi}, \quad \alpha = \frac{\sin^2 \varphi}{\cos \varphi}, \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \quad (2.21)$$

Из (2.21) вытекает, что значение r , удовлетворяющее условию $0 \leq r \leq 1$, равно

$$r = (1 - \sin \varphi) / \cos \varphi \quad (2.22)$$

Учитывая (2.20), решение в области III будет

$$y_j = r^j(C_1e^{-ij\varphi} + C_3e^{ij\varphi}) + r^{-j}(C_2e^{ij\varphi} + C_4e^{-ij\varphi}) \quad (2.23)$$

Поскольку $r < 1$, то член, содержащий r^j , неограниченно возрастает при $j \rightarrow \infty$. Решение должно быть ограниченным и действительным, следовательно, $C_2 = C_4 = 0$ и его можно представить в виде

$$y_j = 2r^j(A \cos j\varphi + B \sin j\varphi) \quad (2.24)$$

где A и B – постоянные. Решения (2.12) и (2.24) совпадают с решениями Томсона [7, 8].

3. Определение постоянных. Смещения атомов (2.12), (2.18) и (2.24) содержат постоянные, которые определяются из условия сшивания решений на границе между областями I и II и областями II и III (см. фиг. 1). Эти условия получаются следующим образом. Запишем, например уравнение (2.4) для атома с номером $j = m - 2$:

$$y_{m-4} - 4y_{m-3} + 6y_{m-2} - 4y_{m-1} + y_m = 0 \quad (3.1)$$

В этом уравнении все смещения принадлежат области I, кроме смещения y_m . Смещение y_m принадлежит атому, находящемуся в области II и имеющему в этой области номер $j = 0$. Таким образом необходимо потребовать

$$y_m(\text{I}) = y_0(\text{II}) \quad (3.2)$$

Записывая последовательно уравнение (2.4) для атома с номером $j = m - 1$, а также уравнение (2.7) для атомов в области II с номерами $j = 1$ и $j = 0$, получим, учитывая (3.2), соотношения

$$\begin{aligned} y_{m+1}(\text{I}) &= y_1(\text{II}), \quad y_m(\text{I}) = y_0(\text{II}), \quad y_{m-1}(\text{I}) = y_{-1}(\text{II}) \\ y_{m-2}(\text{I}) &= y_{-2}(\text{II}) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Запишем соотношения (3.3) в явном виде, учитывая решения (2.12) и (2.18):

$$\begin{aligned} \frac{P}{6\gamma}((m+1)^3 - (m+1)) + (y_1 - y_0)(m+1) + y_0 &= C_1\lambda_1 + C_2\lambda_2 + C_3\lambda_3 + C_4\lambda_4 + \eta u_0 \\ \frac{P}{6\gamma}(m^3 - m) + (y_1 - y_0)m + y_0 &= C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + \eta u_0 \\ \frac{P}{6\gamma}((m-1)^3 - (m-1)) + (y_1 - y_0)(m-1) + y_0 &= C_1\lambda_1^{-1} + C_2\lambda_2^{-1} + C_3\lambda_3^{-1} + C_4\lambda_4^{-1} + \eta u_0 \\ \frac{P}{6\gamma}((m-2)^3 - (m-2)) + (y_1 - y_0)(m-2) + y_0 &= C_1\lambda_1^{-2} + C_2\lambda_2^{-2} + C_3\lambda_3^{-2} + C_4\lambda_4^{-2} + \eta u_0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Сшивание решений на границе областей II и III происходит аналогичным образом. Условия сшивания таковы:

$$y_{s+1}(\text{II}) = y_1(\text{III}), \quad y_s(\text{II}) = y_0(\text{III}), \quad y_{s-1}(\text{II}) = y_{-1}(\text{III}), \quad y_{s-2}(\text{II}) = y_{-2}(\text{III}) \quad (3.5)$$

Записывая эти соотношения в явном виде, получим

$$\begin{aligned} C_1\lambda_1^{s+1} + C_2\lambda_2^{s+1} + C_3\lambda_3^{s+1} + C_4\lambda_4^{s+1} + \eta u_0 &= 2r(A \cos \varphi + B \sin \varphi) \\ C_1\lambda_1^s + C_2\lambda_2^s + C_3\lambda_3^s + C_4\lambda_4^s + \eta u_0 &= 2A \\ C_1\lambda_1^{s-1} + C_2\lambda_2^{s-1} + C_3\lambda_3^{s-1} + C_4\lambda_4^{s-1} + \eta u_0 &= 2/r(A \cos \varphi - B \sin \varphi) \\ C_1\lambda_1^{s-2} + C_2\lambda_2^{s-2} + C_3\lambda_3^{s-2} + C_4\lambda_4^{s-2} + \eta u_0 &= 2/r^2(A \cos 2\varphi - B \sin 2\varphi) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Восемь уравнений систем (3.4) и (3.6) содержат восемь постоянных, которые необходимо определить. Опуская элементарные выкладки, запишем решения для y_j в безразмерном виде ($y_j \equiv y_j/\mu_0$, $P \equiv P/2\rho\alpha\gamma\mu_0$), удобном для численного моделирования.

область I

$$y_j = P \left\{ \varphi_s(1 - m(\lambda_1 - 1)) + \chi_s(1 - m(\lambda_2 - 1)) + H_s(1 - m(\lambda_3 - 1)) + I_s(1 - m(\lambda_4 - 1)) + \frac{\rho\alpha}{3}(2m^3 + 3m^2 + m) \right\} + \quad (3.7)$$

$$+ \psi_s(1 - m(\lambda_1 - 1)) + \eta_s(1 - m(\lambda_2 - 1)) + X_s(1 - m(\lambda_3 - 1)) + Y_s(1 - m(\lambda_4 - 1)) + \eta$$

область II

$$y_j = P\{\varphi_s\lambda_1^j + \chi_s\lambda_2^j + H_s\lambda_3^j + I_s\lambda_4^j\} + \psi_s\lambda_1^j + \eta_s\lambda_2^j + X_s\lambda_3^j + Y_s\lambda_4^j + \eta \quad (j = 0, 1, \dots, s-1) \quad (3.8)$$

область III

$$y_j = 2r^j(A \cos j\varphi + B \sin j\varphi) \quad (j = 0, 1, \dots)$$

$$A = \frac{1}{2}(C_1\lambda_1^s + C_2\lambda_2^s + C_3\lambda_3^s + C_4\lambda_4^s) + (\frac{1}{2})\eta \quad (3.9)$$

$$B = (\frac{1}{2})\rho(C_3\lambda_3^s + C_4\lambda_4^s - C_1\lambda_1^s - C_2\lambda_2^s)$$

Постоянные, фигурирующие в формулах (3.7)–(3.9), определяются соотношениями

$$\begin{aligned} C_1 &= P\varphi_s + \psi_s, & C_2 &= P\chi_s + \eta_s \\ C_3 &= PH_s + X_s, & C_4 &= PI_s + Y_s \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\varphi_s = \frac{m(\lambda_1 - 1) + 1}{\lambda_1 - \lambda_2} + H_s \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} + I_s \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2}$$

$$\psi_s = X_s \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} + Y_s \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} \quad (3.11)$$

$$\chi_s = \frac{m(1 - \lambda_2) - 1}{\lambda_1 - \lambda_2} - H_s \frac{\lambda_2 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} - I_s \frac{\lambda_2 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2}$$

$$\eta_s = -X_s \frac{\lambda_2 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} - Y_s \frac{\lambda_2 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2}$$

$$\Delta_s = A_s F_s - E_s B_s$$

$$H_s = \Delta_s^{-1}(G_s B_s - D_s F_s), \quad I_s = \Delta_s^{-1}(E_s D_s - G_s A_s) \quad (3.12)$$

$$X_s = (2\Delta_s)^{-1} \eta \sin \varphi [1 - (\rho r)^{-1}] F_s + (1 + (\rho r)^{-1}) B_s]$$

$$Y_s = (2\Delta_s)^{-1} \eta \sin \varphi [1 - (\rho r)^{-1}] E_s + (1 + (\rho r)^{-1}) A_s]$$

$$f(\lambda_i) = \lambda_i^{s-1} \left(1 - \frac{\cos \varphi}{r} \lambda_i + \frac{\sin \varphi}{2\rho r} (1 - \rho^2) \lambda_i \right)$$

$$g(\lambda_i) = \frac{\sin \varphi}{2\rho r} (1 + \rho^2) \lambda_i^s$$

$$\begin{aligned}
 A_s &= \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} f(\lambda_1) - \frac{\lambda_2 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} f(\lambda_2) + g(\lambda_3) \\
 B_s &= \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} f(\lambda_1) - \frac{\lambda_2 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} f(\lambda_2) + g(\lambda_4) \\
 D_s &= (\lambda_1 - \lambda_2)^{-1} ((m\lambda_1 - m + 1)f(\lambda_1) + (-m\lambda_2 + m - 1)f(\lambda_2)) \\
 E_s &= \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} g(\lambda_1) - \frac{\lambda_2 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} g(\lambda_2) - f(\lambda_3) \\
 F_s &= \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} g(\lambda_1) - \frac{\lambda_2 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} g(\lambda_2) - f(\lambda_4) \\
 G_s &= (\lambda_1 - \lambda_2)^{-1} ((m\lambda_2 - m + 1)g(\lambda_1) + (-m\lambda_2 + m - 1)g(\lambda_2))
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Полученные формулы обеспечивают правильные предельные переходы. В частности, при $m = 0, s = 0$ смещения, определяемые формулами (3.7)–(3.9), должны совпадать. Это действительно имеет место. При произвольном m и $s = 1$ получается решение работы [7]. Полученные формулы являются также основой для численного моделирования процессов разрушения. Однако, прежде чем перейти к этому, вернемся к явлению решеточного захвата.

4. Решеточный захват. Рассмотрим решеточный захват для случая, когда в области II находится одна нелинейная связь. Разумеется, полученные здесь результаты будут во многом совпадать с результатами работы [7], где рассматривался аналогичный случай. Разница заключается в том, что здесь рассматривается конкретная сила (2.1) и находится конкретное значение функции решеточного захвата R .

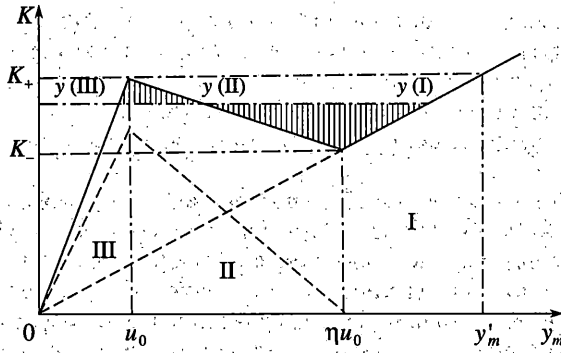
Проводя для рассматриваемого случая процедуру сшивания решений, можно получить следующее уравнение для смещения $y_m(I) = y_0(II)$:

$$\frac{P}{2\gamma}(m \sin \varphi + 1) = \frac{\sin^3 \varphi}{1 + \sin \varphi} y_m + \frac{f(y_m)}{\gamma} \tag{4.1}$$

где функция $f(y_m)$ определяется соотношением (2.1). Уравнение (4.1) идентично соответствующему уравнению работы [7].

Левая часть (4.1) представляет собой внешнее воздействие на трещину. Правая часть – реакцию на это воздействие со стороны решетки (первый член) и со стороны пары атомов с нелинейным законом взаимодействия (второй член). На фиг. 3 эти члены изображены графически штрихами. Результат их сложения представляет сплошная кривая. Это кривая имеет место только тогда, когда наклон прямой, изображающей реакцию решетки, равный $\sin^3 \varphi / (1 + \sin \varphi)$, меньше наклона прямой, изображающей силу межатомного взаимодействия в области $0 \leq y_m \leq u_0$. Наклон этой прямой равен $a = \beta/\gamma$.

Когда величина $K = 1/2(P/\gamma)(m \sin \varphi + 1)$ оказывается заключенной между K_+ и K_- (фиг. 3) имеются три решения. Два из них $y(I)$ и $y(III)$ отвечают равновесному положению трещины длины m и $m - 1$, соответственно. В этих положениях энергия тела с трещиной имеет минимумы. Решение $y(II)$ отвечает неустойчивому положению равновесия, которому соответствует седловая точка. Таким образом, движение трещины вперед от $y(I)$ до $y(II)$, также как и движение трещины назад от $y(III)$ до $y(II)$ сопровождается преодолением энергетического барьера. Величина барьеров пропорциональна заштрихованным площадям на фиг. 3. В этом и состоит суть решеточного захвата.



Фиг. 3

Таким образом, решеточный захват имеет место при выполнении двух неравенств:

$$\frac{\sin^3 \varphi}{1 + \sin \varphi} < a = 2\alpha^2 = \frac{2 \sin^4 \varphi}{\cos^2 \varphi} \quad (4.2)$$

$$K_- \leq K \leq K_+ \quad (4.3)$$

Первое неравенство сводится к условию

$$\sin \varphi > 1/3 \quad (4.4)$$

а второе при использовании явных значений K_+ и K_- , вычисляемых с помощью (4.1) и (2.1), сводится к

$$\sin \varphi > (\eta - 1)/(\eta + 1) \quad (4.5)$$

Истинный или реалистичный потенциал (сила) межатомного взаимодействия всегда асимметричен ($\eta > 2$). Достаточно сказать, что асимметрией этой кривой (ангармоническое приближение в теории твердых тел) объясняются такие свойства твердых тел как решеточная теплопроводность и тепловое расширение [15]. Тогда, считая неравенство $\eta > 2$ очевидным, приходим к выводу, что если выполняется (4.5), то автоматически выполняется (4.4). Таким образом, (4.5) можно рассматривать как условие решеточного захвата.

Функция решеточного захвата определяется как

$$R = \frac{K_+}{K_-} = \frac{1 + \sin \varphi}{\eta - 1 - \sin \varphi} \quad (4.6)$$

Так как решеточный захват имеет место при $R > 1$, то это условие, как видно из (4.6), вновь сводится к условию (4.5).

Реализация условия (4.5) зависит от упругих свойств решетки и параметра η потенциала межатомного взаимодействия. В частности, видно, что длиннодействующие потенциалы ($\eta \gg 1$) ведут к исчезающе малому решеточному захвату: То же самое утверждается и в [16], авторы которой приходят к выводу, что решеточный захват не есть универсальное свойство, обусловленное периодичностью дискретной решетки кристалла. В пользу того, что решеточный захват определяется прежде всего особенностями нелинейной силы межатомного взаимодействия говорят также и цитированные работы В.В. Новожилова.

Разумеется, эти выводы нельзя распространять на ситуацию, когда в зоне сцепления II находится несколько нелинейных связей. Чтобы ответить на вопрос о существовании решеточного захвата в этом случае, необходимо построить зависимость $P(m)$, где P – равновесная внешняя нагрузка, а m – длина трещины. Построение этой зависимости может быть осуществлено при численном моделировании процесса разрушения.

5. Численное моделирование процесса разрушения. Идея моделирования заключается в следующем. Полагаем, что каждому значению смещения $y_0(I)$ головного атома, к которому приложены внешние силы, отвечает единственное равновесное состояние тела с трещиной. Монотонно увеличивая смещение $y_0(I)$, проходим ряд сменяющих друг друга равновесных состояний. Эти состояния характеризуются набором смещений $y_j(I)$, $y_j(II)$, $y_j(III)$, длиной трещины m , длиной области сцепления s и величиной внешней нагрузки. Задача состоит в построении зависимости $P = P(m)$.

Будем описывать состояние тела с трещиной символом (m, s) , где первое число означает длину трещины, второе – длину зоны сцепления. Исходным состоянием является состояние идеального кристалла без трещины, т.е. состояние $(0, 0)$.

Задаем основные параметры задачи a и η . Вычисляем параметры α , r , ϕ (формулы (2.17), (2.21) и (2.22)) и корни характеристического уравнения λ_i (формулы (2.16)). После этого последовательно вычисляем постоянные по формулам (3.10)–(3.13). Задаем смещение $y_0(I)$. Очевидно, что $y_0(I) < 1$ отвечает упруго деформированному кристаллу без трещины. Поэтому уместно положить сразу $y_0(I) = 1$. Подставляя это значение в формулу (3.7), находим значение нагрузки P . Значение $y_0(I) = 1$ отвечает переходу атома из области III в область II. Таким образом, приходим к состоянию $(0, 1)$.

Снова увеличиваем $y_0(I)$ и для этого конкретного значения определяем нагрузку P . Используем полученное значение нагрузки для расчета смещений $y_0(II)$ и $y_0(III)$. Если атом переходит из области II в область I ($y_0(II) \geq \eta$), то приходим к состоянию $(1, 0)$. Если при этом одновременно другой атом переходит из области III в область II ($y_0(III) \geq 1$), то реализуется состояние $(1, 1)$ и т.д.

Результаты моделирования представлены на графиках $P = P(m)$. Были исследованы следующие варианты: $a = 1/128$, $\eta = 2, 3$; $a = 0.1$, $\eta = 2, 3$; $a = 1$, $\eta = 2, 3$.

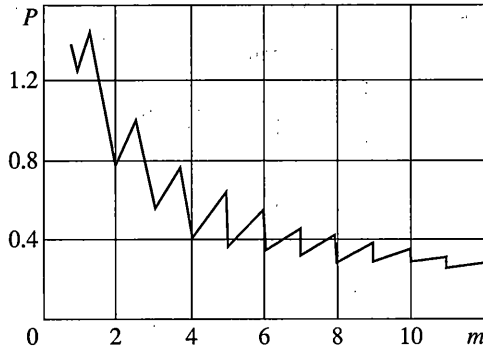
Характерной чертой представленных на фиг. 4, 5 зависимостей является наличие на графиках протяженных областей типа “спина динозавра” (термин, предложенный в [8]). Рассмотрим более подробно случай $a = 1$, $\eta = 3$ (см. фиг. 4).

Начиная от состояния $(0, 0)$ по мере роста $y_0(I)$ нагрузка P растет и при $y_0(I) = 1$ достигает значения $P = 2.41$. Атом переходит из области III в область II и реализуется состояние $(0, 1)$. Дальнейшее увеличение $y_0(I)$ приводит к падению нагрузки, продолжающемуся до тех пор, пока $y_0(II)$ не станет равным $y_0(II) = 3$, т.е. возникнет состояние $(1, 0)$. Следует отметить, что в течение этого процесса ни один атом не переходит из области III в область II.

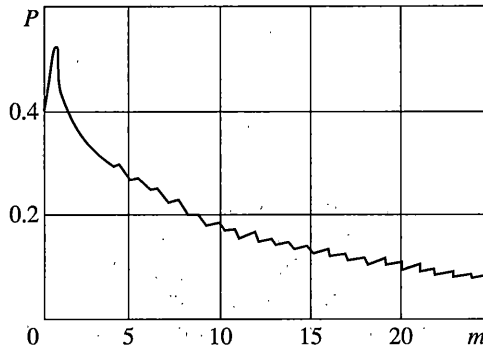
Затем при увеличении $y_0(I)$ процесс повторяется: сначала атом переходит из области III в область II, а затем из области II в область I. На фиг. 4 на восходящих ветвях реализуется состояние с $s = 0$, а на нисходящих с $s = 1$. Подчеркнем, что состояний с $s > 1$ не обнаружено.

Такая ситуация имеет место вплоть до значений $m = 5$. Эволюция состояния $(5, 0)$ развивается следующим образом. Как только атом, находящийся в области III, достигнет границы с областью II, то при дальнейшем увеличении $y_0(I)$ оказывается, что смещения этого атома, вычисленные по формуле (3.8), описывающей область II, лежат в области III. Однако смещение атома однозначно определяет область, где он находится, и, следовательно, возникшая ситуация нереальна.

Выход из создавшегося положения заключается в следующем. Нагрузке K_+ (см. фиг. 3), при которой атом оказывается на границе областей II и III, отвечает так-



Фиг. 4

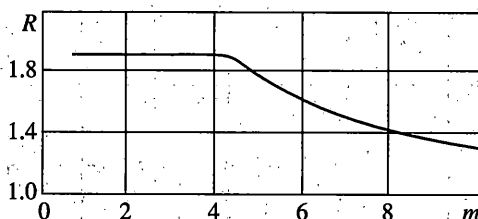


Фиг. 5

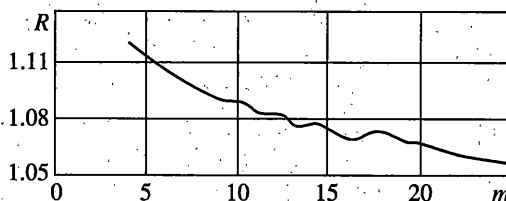
же смещение y'_m . Разумно предположить, что при K_d атом скачком, минуя область II, переходит в область I. Таким образом реализуется состояние $(6, 0)$, а смещение атома будет равным y'_m . Дальнейший расчет показывает, что рост трещины происходит по указанному механизму скачкообразного перехода.

Следует отметить, что переход атома из области III в область II (так сказать, “надрыв” межатомной связи) и из области II в область I (полный разрыв связи), рассматриваемый как изменение состояния трещины (m, s) , приводит к перенормировке постоянных, описывающих смещение в областях I, II и III, что, в свою очередь, приводит к изменению характера зависимости $P(m)$ (нисходящие и восходящие ветви). В точках P_+ , отвечающих максимальным значениям нагрузки, происходит переход атома из области III в область II или “надрыв” межатомной связи трещины m . В точках P_- , отвечающих минимальным значениям нагрузки, происходит полный разрыв связи. Эти точки можно рассматривать также, как точки, где происходит залечивание межатомной связи трещины $m + 1$. Таким образом, вычисляя P_+/P_- , можно определить функцию решеточного захвата.

Для длин трещин $m = 1, 2, 3, 4$ было получено одно и то же значение $R = P_+/P_- = 1.94$. Значение R , вычисленное по формуле (4.6), для $a = 1, \eta = 3$ дает $R = 1.94$. Для длин трещин $m \geq 5$ вычисленные значения R монотонно убывают, как показано на фиг. 6. Зависимость $R(m)$, по-видимому, асимптотически стремится к $R = 1$. Таким образом,



Фиг. 6



Фиг. 7

функция решеточного захвата R зависит от длины трещины в той ее области, где реализуется скачкообразный механизм разрушения.

Обсудим зависимость $P(m)$ для $a = 1/128$, $\eta = 3$, представленную на фиг. 5. При $a = 1/128$ условие решеточного захвата (4.6) не соблюдается.

Вид зависимости, представленной на фиг. 5, свидетельствует, что и в этом случае имеет место решеточный захват. Однако, он развивается не сразу – начальный участок является достаточно гладким. В области “спины динозавра” имеет место следующая ситуация: восходящим ветвям зависимости отвечают 2 атома в зоне сцепления, а нисходящим ветвям 3 атома. Это имеет место вплоть до $m = 21$, когда начинается процесс скачкообразного разрушения. Тогда число атомов в зоне сцепления не меняется и равно $s = 2$.

Зависимость $R(m)$ показана на фиг. 7. Здесь плато, характерное для $a = 1$, отсутствует. Имеет место медленное осциллирующее понижение величины R , сменяющееся монотонным понижением при переходе к скачкообразному механизму разрушения.

Кривые для $\eta = 2$, которые здесь не приведены, в качественном отношении подобны приведенным кривым для $\eta = 3$. Отличие заключается в моменте наступления механизма скачкообразного разрушения и в ширине зоны сцепления. Для $a = 1$, ширина зоны сцепления одинакова для $\eta = 2$ и $\eta = 3$, а для $a = 1/128$ при $\eta = 2$ меняется от $s = 1$ до $s = 2$ до $m = 15$ и $s = 1$ для $m \geq 16$.

Значение $a = 1/10$ выбрано для исследования потому, что при $\eta = 2$ условия решеточного захвата (4.5) выполняются, а при $\eta = 3$ нет. Оказывается, что при $\eta = 2$ процесс разрушения развивается по типу $a = 1$, $\eta = 2, 3$, а при $\eta = 3$ процесс развивается по типу $a = 1/128$, $\eta = 2$.

6. Выводы. Как при жестких $\beta \geq \gamma$, так и при податливых $\beta < \gamma$ решетках имеет место явление решеточного захвата. При жестких решетках оно наступает сразу, уже при $m \geq 1$, а для податливых – на более поздних стадиях (например, при $m \geq 5$ для $a = 1/128$).

Функция решеточного захвата при малых длинах трещины приблизительно постоянна, а затем, при смене механизма роста, начинает асимптотически убывать до $R = 1$. Отметим, что при $R = 1$ энергетические барьеры, препятствующие движению трещины, исчезают.

Существуют два элементарных механизма разрушения. Первый представляет собой непрерывный переход атома из области упругого взаимодействия III в область зоны сцепления II и, наконец, в область раскрытой трещины I. Этот механизм реализуется на начальной стадии роста трещины. Второй механизм – скачкообразный: атом, достигнув границы областей III и II, не задерживаясь в области II, скачком переходит в область I. Этот механизм возникает при больших длинах трещины. Физическая причина смены механизма пока неясна.

Число атомов в зоне сцепления мало (от $s = 3$ до $s = 2$ при $a = 1/128$, $\eta = 3$ и от $s = 1$ до $s = 0$ при $a = 1$, $\eta = 3$). Можно высказать предположение, что атомов в зоне сцепления ровно столько, сколько их нужно для обеспечения решеточного захвата.

Физическая причина самого явления решеточного захвата пока не вполне ясна. Необоснованной представляется аналогия между решеточным захватом и преодолением барьеров Пайерлса при движении дислокации в кристалле. Важную роль в решеточном захвате играют параметры нелинейного межатомного взаимодействия, хотя нельзя игнорировать влияние решетки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баренблатт Г.И. О равновесных трещинах, образующихся при хрупком разрушении // Докл. АН СССР. 1959. Т: 127. № 1. С. 47–50.
2. Dugdale D.S. Yielding of steel sheets containing slits // J. Mech. Phys. Solids. 1960. V. 8. № 2. P. 100–104.
3. Леонов М.Я., Панасюк В.В. Розвиток найдрібніших тріщин в твердому тілі // Прикл. механіка. 1959. Т. 5. Вып. 4. С. 391–401.
4. Cox B.N., Marshall D.B. Concepts for bridged cracks in fracture and fatigue // Acta Metallurg. Materialia. 1994. V. 42. № 2. P. 341–363.
5. Goldstein R., Perelmuter M. Modeling of bonding at an interface crack // Intern. J. Fract. 1999. V. 99. № 1–2. P. 53–79.
6. Thomson P., Hsieh C., Rana V. Lattice trapping of fracture cracks // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. № 8. P. 3154–3160.
7. Fuller E.R., Thomson R.M. Lattice theories of fracture // Fracture Mechanics of Ceramics / Ed. R.C. Brandt et al. N.Y.; L.: Plenum Press, 1978. V. 4. P. 507–548.
8. Томсон Р. Физика разрушения // Атомистика разрушения / Под ред. Гольдштейна Р.В. М.: Мир, 1987. С. 104–144.
9. Smith E. The effect of the discreteness of the atomic structure on cleavage crack extension: use of a simple one dimensional model // Mat. Sci. and Eng. 1975. V. 17. № 1. P. 125–130.
10. Новожилов В.В. О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // ПММ. 1969. Т. 33. Вып. 2. С. 212–222.
11. Новожилов В.В. К основам теории равновесных трещин в упругих телах // ПММ. 1969. Т. 33. Вып. 5. С. 797–812.
12. Слепян Л.И. Механика трещин. Л.: Судостроение, 1990. 296 с.
13. Морозов Н.Ф., Паукино М.В. Дискретные и гибридные модели механики разрушения. СПб: Изд-во СПб ун-та, 1995. 157 с.
14. Гельфонд А.О. Исчисление конечных разностей. М.: Наука, 1967. 375 с.
15. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.
16. Дайнис Г., Пэскин А. Моделирование трещин с помощью вычислительных машин // Атомистика разрушения / Под ред. Гольдштейна Р.В. М.: Мир, 1987. С. 177–212.