

© 2006 г. Р.В. ГОЛЬДШТЕЙН, Г.А. ШАТАЛОВ

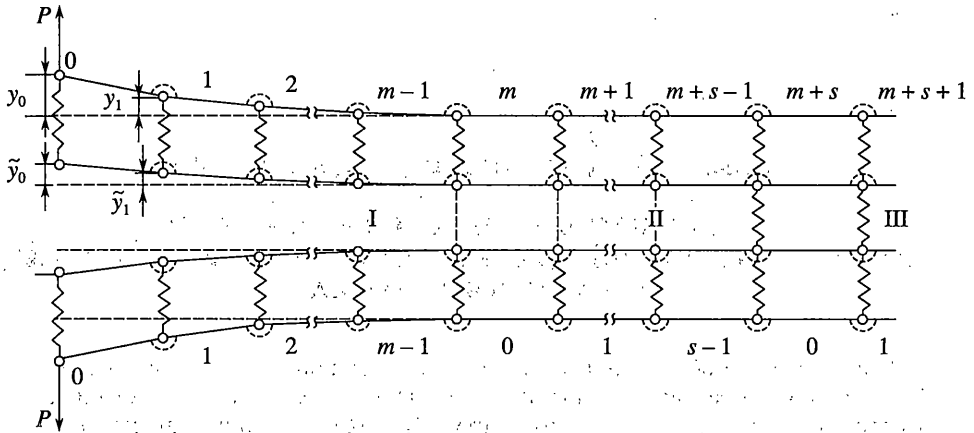
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗРУШЕНИЯ В РАМКАХ ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ АТОМИСТИЧЕСКОЙ ТРЕЩИНЫ НОРМАЛЬНОГО ОТРЫВА

Предложена обобщенная атомная модель трещины томсоновского типа. Считается, что краевая трещина разделяет четыре полубесконечные цепочки атомов. Взаимодействие атомов в пределах каждой цепочки характеризуется пружинами, имеющими изгибную жесткость, в то время как взаимодействие между атомами соседних цепочек моделируется билинейными связями (пружинами), работающими на растяжение. Нагружение осуществляется растягивающими сосредоточенными силами, приложенными к крайним атомам внешних атомных цепочек. Выполнено аналитико-численное моделирование процессов деформирования и разрыва связей вблизи конца трещины и получена оценка размера зоны сцепления в зависимости от длины трещины и параметров связей. Проанализирована роль добавочных, в сравнении с моделью Томсона, атомных цепочек и их влияние на перераспределение усилий и смещения в зоне сцепления, а также размер самой этой зоны.

1. Введение. Процессы деформирования и подготовки разрушения, происходящие в вершине трещины, в значительной мере определяют трещиностойкость материала. Для учета этого обстоятельства, начиная с работ [1–3], предлагаются модели, в которых вводится так называемая зона сцепления в вершине трещины, где предполагается наличие сил взаимодействия между поверхностями трещины (сил сцепления). Эти силы каким-то образом отражают действующие механизмы взаимодействия между атомами, лежащими на разных берегах трещины, а также механизмы деформирования структурных элементов, расположенных вблизи конца трещины.

В работе рассматривается атомный механизм взаимодействия поверхностей трещины в зоне сцепления. Строится оценка размеров зоны сцепления в терминах параметров межатомного взаимодействия с учетом влияния соседних с поверхностными рядами атомов материала. Обзор различных решеточных моделей, используемых в механике разрушения, приведен в работах [4–6]. Что касается самой оценки размеров зоны сцепления, то она впервые, по-видимому, была проведена в работах [7, 8]. В этих работах рассматривалась атомистическая модель трещины томсоновского типа, представляющая собой две полубесконечные цепочки атомов (модель описана ниже). В [9, 5], где та же самая модель исследована для демонстрации явления решеточного захвата, она представляла собой две области: область I, где отсутствует взаимодействие между атомами на разных берегах трещины (область раскрытой трещины), и область III, где межатомное взаимодействие описывается в рамках гармонического приближения теории решеток (линейная теория упругости). Рассматривалась только одна межатомная связь с нелинейным законом взаимодействия, лежащая между областями I и III [5].

В [7, 8] между областями I и III введена область II с произвольным числом межатомных нелинейных связей. По существу, эта область и представляет собой зону сцепления. Проведенное аналитическо-численное исследование обнаружило ряд неочевидных результатов: длина зоны сцепления оказалась малой (единицы межатомных расстояний); имеют место два элементарных механизма разрушения. В процессе первого межатом-



Фиг. 1

ная связь постепенно переходит из области III в область II и затем, пройдя область II, окончательно рвется, оказываясь в области раскрытой трещины I. В процессе второго — межатомная связь, дойдя до границы областей III и II, скачкообразно переходит в область I.

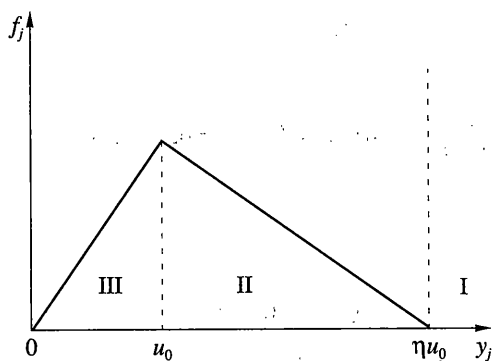
Эти результаты, однако, нуждаются в уточнении. Дело в том, что рассмотренная атомистическая модель является нереалистичной. В частности, в рамках этой модели отсутствует процесс релаксации упругих напряжений, имеющий место в области кристалла, окружающего трещину, просто потому, что сама эта область отсутствует. Таким образом, задача построения более реалистичных моделей является актуальной.

Настоящая работа представляет собой определенный шаг в этом направлении. Рассматривается модель кристалла с трещиной, представляющую собой четыре полубесконечные цепочки. Для краткости эту модель будем называть обобщенной. Следует отметить, что полученные результаты могут иметь также и практическое значение, поскольку современные нанотехнологии позволяют получать слоистые системы с толщинами слоев порядка нескольких межатомных расстояний. Поведение трещин-расслоений может оказаться адекватным предлагаемой теории.

2. Модель трещины. Уравнения равновесия и их решения. Фиг. 1 изображает исследуемую модель атомистической трещины. Она состоит из четырех полубесконечных цепочек атомов. Взаимодействие между атомами в пределах одной цепочки моделируется с помощью недеформируемых стержней, соединенных шарнирно. Между стержнями находятся изгибные пружины, недеформированные в исходном состоянии (изображены штрихом). Изгибные пружины работают в чисто упругой области и характеризуются изгибной жесткостью γ . Взаимодействие между атомами разных цепочек моделируется пружинами, работающими на растяжение-сжатие и являющимися, вообще говоря, нелинейными. К крайним атомам приложены нормальные силы P , а смещения атомов y_j для внешней цепочки и \tilde{y}_j для внутренней цепочки рассматриваются как строго вертикальные.

Зависимость силы взаимодействия между атомами разных цепочек от смещения \tilde{y}_j описывается следующим выражением:

$$\begin{aligned}
 f_j &= \beta \tilde{y}_j, \quad \tilde{y}_j \leq u_0 \\
 f_j &= -\frac{\beta}{\eta - 1} (\tilde{y}_j - \eta u_0), \quad u_0 \leq \tilde{y}_j \leq \eta u_0 \\
 f_j &= 0, \quad \tilde{y}_j \geq \eta u_0
 \end{aligned} \tag{2.1}$$



Фиг. 2

В этом выражении β – жесткость пружины сцепления, η – произвольное число, позволяющее менять наклон нисходящей ветви зависимости (2.1), которая изображена на фиг. 2.

Тело с трещиной, изображенное на фиг. 1, имеет три области. Область I отвечает полностью раскрытой трещине, где межатомное взаимодействие поверхностей трещины отсутствует ($f_j = 0$).

Область II отвечает зоне сцепления (здесь пружины сцепления изображены пунктиром). Для описания взаимодействия атомов на разных берегах трещины используется нисходящая ветвь на фиг. 2.

Область III представляет собой упругодеформированную решетку, взаимодействие между атомами которой описывается восходящей ветвью на фиг. 2. На фиг. 1 на внешней верхней цепочке показана сквозная нумерация атомов, а на нижней цепочке показана нумерация в пределах областей, на которые разделен кристалл с трещиной. Эту нумерацию более удобно использовать при расчетах.

Будем состояние трещины описывать символом (m, s) , где m – число полностью разорванных межатомных связей или длина трещины (область I), а s – число “надорванных” межатомных связей или длина зоны сцепления II. В задачу моделирования процессов разрушения входит определение равновесной нагрузки P , при которой реализуется состояние (m, s) , и определение атомных смещений y_j и \tilde{y}_j . Это позволяет найти другие параметры, характеризующие разрушение.

Уравнение равновесия тела с трещиной имеет вид

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

Здесь w – потенциальная энергия тела с трещиной. Потенциальная энергия w состоит из упругой энергии изгибных пружин и пружин сцепления и включает также работу внешней силы P . Записывая выражения для энергии пружин через смещения y_j и \tilde{y}_j и используя (2.2), получим следующие уравнения равновесия r :

область I:

$$\begin{aligned} \Delta^4 y_{j-2} + a(y_j - \tilde{y}_j) &= 0 \\ \Delta^4 \tilde{y}_{j-2} - a(y_j - \tilde{y}_j) &= 0 \quad (j = 2, 3, \dots, m-1) \\ 2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3 - a(y_1 - \tilde{y}_1) &= 0 \\ 2\tilde{y}_0 - 5\tilde{y}_1 + 4\tilde{y}_2 - \tilde{y}_3 + a(y_1 - \tilde{y}_1) &= 0 \quad (j = 1) \\ P/\gamma - y_0 + 2y_1 - y_2 - a(y_0 - \tilde{y}_0) &= 0 \\ -\tilde{y}_0 + 2\tilde{y}_1 - \tilde{y}_2 + a(y_0 - \tilde{y}_0) &= 0 \quad (j = 0) \end{aligned} \quad (2.3)$$

область II:

$$\begin{aligned} \Delta^4 y_{j-2} + a(y_j - \tilde{y}_j) &= 0 \\ \Delta^4 \tilde{y}_{j-2} - a(y_j - \tilde{y}_j) - \frac{2a}{\eta-1}(\tilde{y}_j - \eta u_0) &= 0 \quad (j=0, 1, \dots, s-1) \end{aligned} \quad (2.4)$$

область III:

$$\begin{aligned} \Delta^4 y_{j-2} + a(y_j - \tilde{y}_j) &= 0 \\ \Delta^4 \tilde{y}_{j-2} - a(y_j - \tilde{y}_j) + 2a\tilde{y}_j &= 0 \quad (j=0, 1, \dots) \end{aligned} \quad (2.5)$$

В уравнениях (1.3)–(1.5) обозначено $a = \beta/\gamma$ и

$$\Delta^n y_j = y_{j+n} - C_n^1 y_{j+n-1} + C_n^2 y_{j+n-2} - \dots \quad (2.6)$$

Уравнения (1.3)–(1.5) являются уравнениями в конечных разностях и их решения разыскиваются в следующем виде [10]:

$$y_j = C\lambda^j \quad (2.7)$$

Здесь λ подлежит определению. Подстановка (2.7) в уравнения (1.3)–(1.5) дает ряд характеристических уравнений, из которых и определяются параметры λ :

область I:

$$\begin{aligned} \lambda_1 = re^{-i\varphi}, \quad \lambda_2 = \lambda_1^{-1}, \quad \lambda_3 = \lambda_1^*, \quad \lambda_4 = \lambda_2^* \\ r = \frac{1 - \sin\varphi}{\cos\varphi}, \quad \alpha = \frac{1}{2}\sqrt{2a} = \sin\varphi \operatorname{tg}\varphi, \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad (2.8)$$

область II:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} = 1 + \xi_1 \pm (\xi_1^2 + 2\xi_1)^{1/2} \\ \lambda_{3,4} = 1 - \xi_2 \pm (\xi_2^2 - 2\xi_2)^{1/2} \\ \xi_1^2 = a \frac{-\eta + 2((\eta-1)^2 + 1)^{1/2}}{4(\eta-1)}, \quad \xi_2^2 = a \frac{\eta - 1 + ((\eta-1)^2 + 1)^{1/2}}{4(\eta-1)} \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\lambda_5 = r_3 e^{-i\varphi_3}, \quad \lambda_6 = \lambda_5^{-1}, \quad \lambda_7 = \lambda_5^*, \quad \lambda_8 = \lambda_6^*$$

$$r_3 = \frac{1 - \sin\varphi_3}{\cos\varphi_3}, \quad \rho_2 = \sin\varphi_3 \operatorname{tg}\varphi_3, \quad 0 \leq \varphi_3 \leq \frac{\pi}{2}$$

область III:

$$\lambda_1 = r_1 e^{-i\varphi_1}, \quad \lambda_2 = \lambda_1^{-1}$$

$$r_1 = \frac{1 - \sin\varphi_1}{\cos\varphi_1}, \quad \frac{1}{2}\sqrt{(2 - \sqrt{2})a} = \sin\varphi_1 \operatorname{tg}\varphi_1, \quad 0 \leq \varphi_1 \leq \frac{\pi}{2} \quad (2.10)$$

$$\lambda_3 = r_2 e^{-i\varphi_2}, \quad \lambda_4 = \lambda_3^{-1}$$

$$r_2 = \frac{1 - \sin\varphi_2}{\cos\varphi_2}, \quad \frac{1}{2}\sqrt{(2 + \sqrt{2})a} = \sin\varphi_2 \operatorname{tg}\varphi_2, \quad 0 \leq \varphi_2 \leq \frac{\pi}{2}$$

Подстановка выражений (2.8), (2.9) и (2.10) в выражение (2.7) позволяет получить выражения для смещений y_j и \tilde{y}_j соответственно в областях I, II и III. Эти решения подвергаются предварительному анализу. В области I для этого анализа используются уравнения (2.3) при $j = 0, 1$. В области III постоянные C выбираются так, чтобы решение было ограниченным. Действительно, как видно из (2.10), имеет место $r_1 < 1$ и $r_2 < 1$. Тогда $|\lambda_2| < 1$ и $|\lambda_4| < 1$. Поскольку j в области III может быть сколько угодно большим, то в решении (2.7) для области III появляются неограниченно возрастающие члены типа λ_2^j и λ_4^j . Разумеется, постоянные при таких членах должны быть положены равными нулю. Тогда, опираясь на результаты анализа, можно записать следующие решения для смещений.

область I:

$$\begin{aligned} \sigma_j &= y_j + \tilde{y}_j = \frac{P}{6\gamma}(j^3 - j) + (\sigma_1 - \sigma_0)j + \sigma_0 \\ \Delta_j &= y_j - \tilde{y}_j = A_j + \Delta_0 B_j + \Delta_1 K_j \quad (j = 0, 1, \dots, m-1) \\ A_j &= \frac{P}{2\alpha\gamma} Q^{-1}(\mu_j + \eta_j \cos \phi) \\ B_j &= Q^{-1}(\beta\mu_j - \delta\eta_j + Qr^{-j} \cos j\phi) \\ K_j &= Q^{-1}(\eta_j - \mu_j \cos \phi) \\ \mu_j &= (r^j - r^{-j}) \cos j\phi, \quad \eta_j = (r^j + r^{-j}) \sin j\phi \\ \beta &= r(1 + 3 \sin^2 \phi + \sin^2 \phi), \quad \delta = 1 + \sin^2 \phi, \quad Q = 2 \operatorname{tg} \phi (1 + \cos^2 \phi) \end{aligned} \tag{2.11}$$

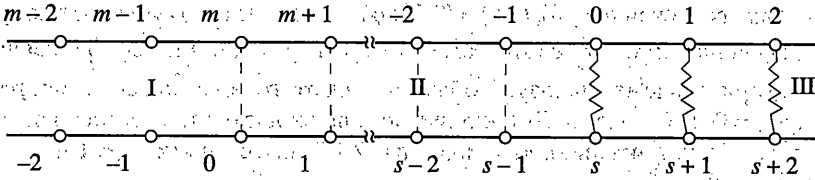
область II:

$$\begin{aligned} y_j &= \sum_{l=1}^8 C_l \lambda_l^j + \eta u_0 \\ \tilde{y}_j &= (u+1) \sum_{l=1}^4 C_l \lambda_l^j + (1-v) \sum_{l=s}^8 C_l \lambda_l^j + \eta u_0 \quad (j = 0, \dots, s-1) \\ u &= 4\xi_1^2/a, \quad v = 4\xi_2^2/a \end{aligned} \tag{2.12}$$

область III:

$$\begin{aligned} y_j &= M_j + N_j, \quad \tilde{y}_j = (\sqrt{2}-1)M_j - (\sqrt{2}+1)N_j \quad (j = 0, 1, \dots) \\ M_j &= \frac{r_1^{j-1}}{\sin \phi_1} (f_1 \sin j\phi_1 - f_0 r_1 \sin(j-1)\phi_1), \quad f_s = \frac{1}{2} \left(y_s + \frac{\sigma_s}{\sqrt{2}} \right) \quad (s = 0, 1) \\ N_j &= \frac{r_2^{s-1}}{\sin \phi_2} (g_1 \sin j\phi_2 - g_0 r_2 \sin(j-1)\phi_2), \quad g_s = \frac{1}{2} \left(y_s - \frac{\sigma_s}{\sqrt{2}} \right) \quad (s = 0, 1) \end{aligned} \tag{2.13}$$

3. Сращивание решений. В выражениях (2.11)–(2.13) фигурируют постоянные, которые подлежат определению. Их определение производится с использованием процедуры сращивания решений на границах областей I, II и III. Сама процедура сращивания по-



Фиг. 3

ясняется на фиг. 3. Он изображает внутренние цепочки атомов обобщенной модели и их нумерацию. Вверху представлена нумерация атомов в области I вблизи границы с областью II и нумерация атомов в области III вблизи границы с областью II. Внизу представлена нумерация атомов в области II.

Поясним процедуру сращивания. Запишем уравнение для смещения \tilde{y}_{m-2} (см. (2.3)). Это уравнение будет содержать смещение \tilde{y}_m , которое, как видно из фиг. 3, находится в области II и имеет нумерацию \tilde{y}_0 (II). Тогда необходимо положить \tilde{y}_m (I) = \tilde{y}_0 (II). Теперь запишем уравнение (1.3) для смещения \tilde{y}_{m-1} . Оно будет содержать смещение \tilde{y}_{m+1} , которое также находится в области II и имеет в ней номер 1. Тогда полагаем \tilde{y}_{m+1} (I) = \tilde{y}_1 (II). Запишем уравнения (1.4) для атома с номером $j = 1$. Оно будет содержать смещение \tilde{y}_{-1} , которому соответствует смещение \tilde{y}_{m-1} (I). Тогда \tilde{y}_{m-1} (I) = \tilde{y}_{-1} (II).

Продолжая эту процедуру для смещений y_j и поступая аналогично на границе между областями II и III, получим уравнения сращивания для y_j :

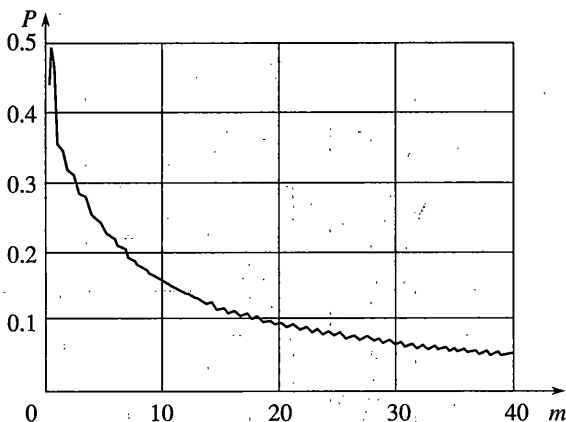
$$\begin{aligned} y_{m-2}(I) = y_{-2}(II), \quad y_{m-1}(I) = y_{-1}(II), \quad y_m(I) = y_0(II), \quad y_{m+1}(I) = y_1(II) \\ y_{s-2}(II) = y_{-2}(III), \quad y_{s-1}(II) = y_{-1}(III), \quad y_s(II) = y_0(III), \quad y_{s+1}(II) = y_1(III) \end{aligned} \quad (3.1)$$

и совершенно аналогичные уравнения для \tilde{y}_j .

Анализ уравнений сращивания является элементарным, но очень громоздким и утомительным. Можно показать, что все постоянные в решениях (2.11)–(2.13) могут быть выражены через постоянные C_l ($l = 1, \dots, 8$), фигурирующие в (2.12). Для постоянных C_l можно получить систему из восьми линейных неоднородных алгебраических уравнений, которые не приведены ввиду громоздкости. Решение этой системы позволяет определить смещения в соответствии с (2.11)–(2.13).

4. Моделирование процессов разрушения. Решения (2.11)–(2.13) определяют атомные смещения кристаллической среды с трещиной, имеющей параметры (m, s) , в зависимости от параметров межатомного взаимодействия $a = \beta/\gamma$ и η и внешней нагрузки P . Эти решения используются для численного моделирования процессов разрушения. Однако, при численном моделировании, кроме параметров a и η в качестве исходного параметра использовалась не величина внешней нагрузки P , а величина смещения головного атома $y_0(I)$.

Принято, что каждому значению \tilde{y}_0 (I) отвечает некоторая равновесная трещина (m, s) и равновесная нагрузка P . Начиная с состояния $(0, 0)$, описывающего деформированный кристалл без трещины, задаем \tilde{y}_0 (I) = 1. Это означает “надрыв” головной межатомной связи и переход этой связи в область II. Таким образом, реализуется состояние $(0, 1)$. Увеличиваем \tilde{y}_0 (I) и следим за смещениями атомов \tilde{y}_0 (II) и \tilde{y}_0 (III). Если при каком-то смещении \tilde{y}_0 (I) окажется, что \tilde{y}_0 (II) достигает величины η , то это означает пе-



Фиг. 4

переход к состоянию (1.0). Если же ранее случится, что \tilde{y}_0 (III) = 1, то это означает переход к состоянию (0.2).

Вообще, при состоянии (m, s) по мере увеличения \tilde{y}_0 (I) контролируются смещения \tilde{y}_0 (II) и \tilde{y}_0 (III). Если \tilde{y}_0 (II) достигает значения η , то происходит переход к состоянию $(m + 1, s - 1)$; если же \tilde{y}_0 (III) достигает 1, то – переход к состоянию $(m, s + 1)$. В каждом из этих случаев определяется значение равновесной нагрузки по формуле

$$P = \frac{\xi_1}{\alpha}(u + 2)\{C_1(1 - \lambda_2) + C_2(1 - \lambda_1) - C_3(1 - \lambda_4) - C_4(1 - \lambda_3)\} + i \frac{\xi_2}{\alpha}(2 - \nu)\{C_5(1 - \lambda_6) + C_6(1 - \lambda_5) - C_7(1 - \lambda_8) - C_8(1 - \lambda_7)\} \quad (4.1)$$

Таким образом, весь процесс роста трещины можно трактовать как сменяющие друг друга равновесные состояния (m, s) и P , отвечающие монотонно возрастающей величине смещения головного атома y_0 (I) или квазистатический рост трещины.

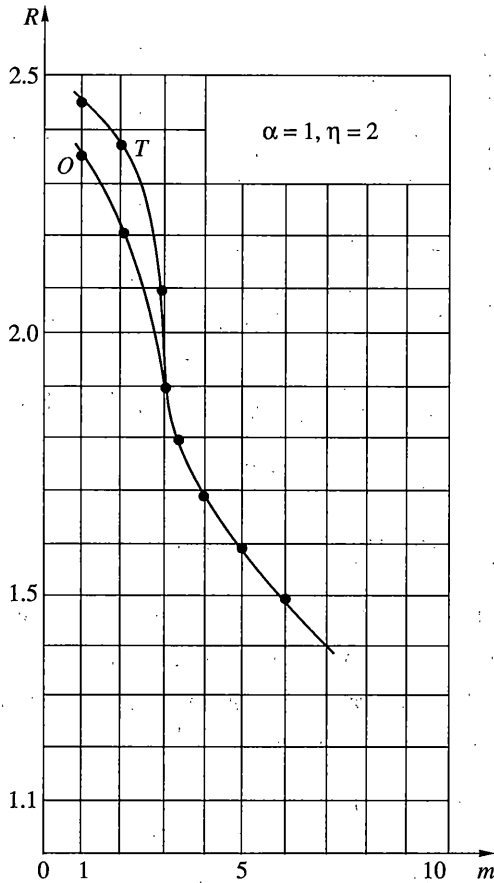
Программа численного моделирования была реализована с помощью системы Математика 4.1, а само моделирование проводилось в безразмерных переменных смещения $y_j \equiv y_j/u_0$ и силы $P \equiv P/(2\gamma\alpha u_0)$.

Следует отметить, что переход $(m, s) \rightarrow (m, s + 1)$ можно трактовать как “надрыв” $(m + s)$ -ой межатомной связи при трещине длиной m . Обозначим отвечающую этому переходу равновесную силу через $(P_+)_m$. Обратимый переход $(m, s + 1) \leftrightarrow (m + 1, s)$ можно, в частности, трактовать как залечивание трещины длиной $(m + 1)$ с образованием трещины длиной m . Пусть $(P_-)_{m+1}$ обозначает силу, отвечающую этому переходу. Тогда, согласно работе [9], где введено понятие решеточного захвата, его величина R может быть записана как

$$R = (P_+)_m / (P_-)_{m+1} \quad (4.2)$$

Таким образом, в результате моделирования можно найти величину R и ее зависимость от длины трещины m .

Полученные в результате моделирования зависимости равновесной нагрузки от длины трещины $P = P(m)$ имеют характерный вид, подобный изображенному на фиг. 4 для

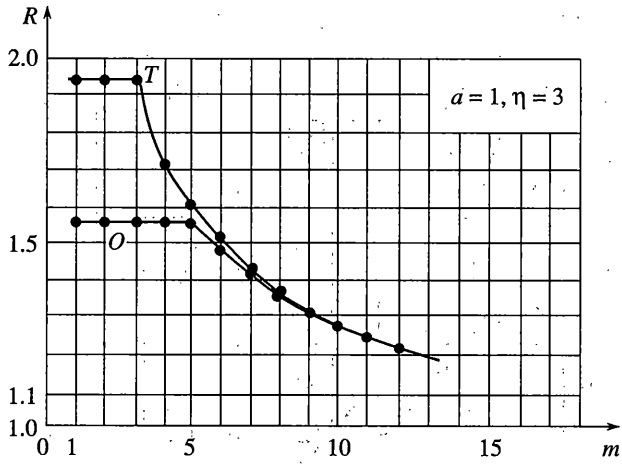


Фиг. 5

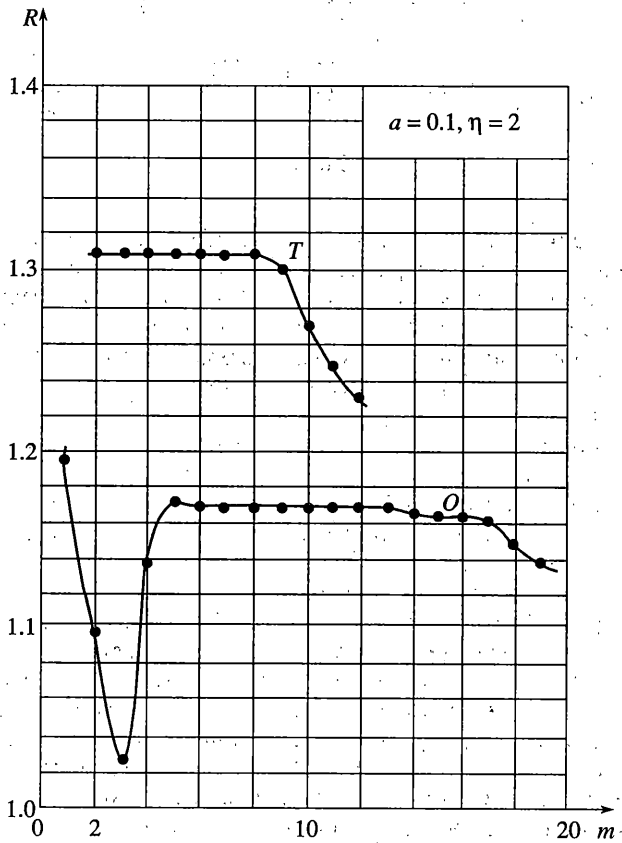
значений $a = 1/128$, $\eta = 3$. Следуя [4], будем называть этот характерный вид “спиной динозавра”. Зависимость на фиг. 4 содержит “восходящие” участки (отрезки прямых с положительным наклоном), отвечающие переходу $(m, s) \rightarrow (m, s + 1)$ и “нисходящие” участки (отрезки прямых с отрицательным наклоном), отвечающие переходу $(m, s + 1) \rightarrow (m + 1, s)$.

Функция $P(m)$ является функцией дискретного аргумента. Поэтому возникает вопрос, как отметить на графике переход $(m, s) \rightarrow (m, s + 1)$. Полагаем, что на участке от m до $m + 1$ функция $\tilde{y}_0(l)$ меняется линейно. Зная $[\tilde{y}_0(l)]_{m, s}$, $[\tilde{y}_0(l)]_{m, s+1}$ и $[\tilde{y}_0(l)]_{m+1, s}$, можно определить “дробное” значение m , отвечающее переходу $(m, s) \rightarrow (m, s + 1)$ и значение нагрузки $(P_+)_m$, реализующееся при этом переходе. Значение нагрузки $(P_-)_{m+1}$ определяется в момент реализации состояния $(m + 1, s)$.

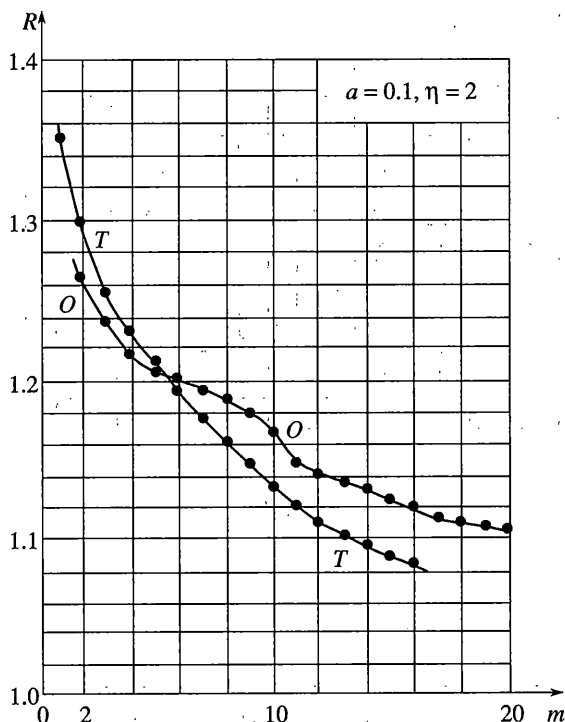
Значение решеточного захвата определялось по формуле (4.2). Соответствующие зависимости $R = R(m)$ представлены на фиг. 5–10, где для сравнения приведены также зависимости $R = R(m)$ для трещины Томсона. Поскольку длина области сцепления между значениями m и $m + 1$ меняется от s на восходящей ветви до $s + 1$ на нисходящей ветви, введем специальное обозначение для этой длины $[s, s + 1]$. Соответствующие символы указаны на фиг. 5–10.



Фиг. 6



Фиг. 7



Фиг. 8

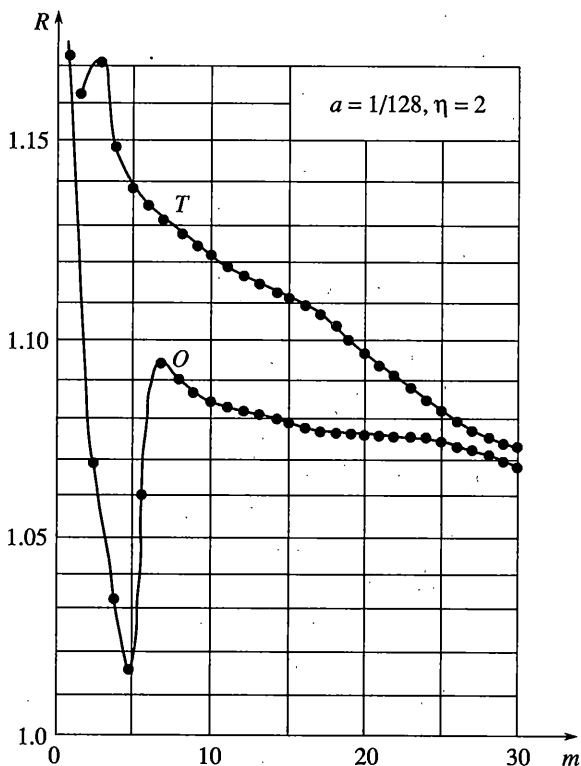
Предваряя краткое обсуждение полученных зависимостей, скажем несколько слов о параметрах моделирования a и η . Параметр $a = \beta/\gamma$ представляет собой отношение жесткости пружин сцепления, описывающих взаимодействие между атомами в разных атомных рядах, к изгибной жесткости пружин, описывающих взаимодействие между атомами одного ряда. Для модельных расчетов была выбрана область $1 \geq a \geq 0.01$, при этом имелось в виду, что жестким решеткам соответствуют большие значения a , податливым – малые значения a .

Параметр η можно связать с работой разрушения. Действительно, площадь под кривой $f_j = f_j(\bar{y}_j)$ (см. фиг. 2) численно равна работе, необходимой для разрыва межатомной связи с номером j . Эта площадь при фиксированных значениях β и u_0 тем больше, чем больше параметр η . Таким образом, полагаем, что чем больше η , тем больше работа разрушения межатомной связи.

Проведем теперь обсуждение полученных зависимостей.

Случай I ($a = 1, \eta = 2$). Этот случай отвечает жестким решеткам. Формирование трещины в рамках обеих моделей происходит совершенно одинаково по последовательности $(0.0) \rightarrow (0.1) \rightarrow (1.0) \rightarrow (1.1) \rightarrow (2.0) \rightarrow (2.1) \rightarrow (3.0)$ и т.д. В зоне сцепления находится либо одна межатомная связь (нисходящие ветви), либо ни одной (восходящие ветви). Длина зоны сцепления равна $[0, 1]$. При $m = 2$ наступает смена механизма разрушения, когда межатомная связь, достигнув области II, скачком оказывается в области III [7, 8]. Скачкообразному механизму отвечают вертикальные нисходящие ветви на кривой $P = P(m)$. При этом механизм зона сцепления (область II) отсутствует. Длина зоны $[0, 0]$.

Зависимость $R = R(m)$ показывает, что величина решеточного захвата падает с ростом m . При больших m решеточный захват в рамках модели Томсона R_T и в рамках обобщенной модели R_{gen} практически совпадают, но всегда $R_T > R_{gen}$.



Фиг. 9

Случай II ($a = 1, \eta = 3$). Этот случай мало чем отличается от уже рассмотренного. Исключение представляет ясно выраженная область плато в зависимости $R(m)$ для малых m . Как показано в [11] для модели Томсона, если в зоне сцепления находится не более одной “надорванной” связи, функция решеточного захвата определяется соотношением

$$R = \frac{1 + \sin \phi}{\eta - \sin \phi} \quad (4.3)$$

Вычисления по формуле (4.3) полностью совпадают с результатами численного моделирования для модели Томсона.

Подобное, но более протяженное, плато имеет место и в обобщенной модели, хотя простой формулы, подобной (4.3), в этом случае не получено.

Смена механизма разрушения происходит на конце плато: при $m = 3$ для модели Томсона и при $m = 5$ для обобщенной модели. И снова в рассматриваемом случае имеет место $R_T > R_{gen}$.

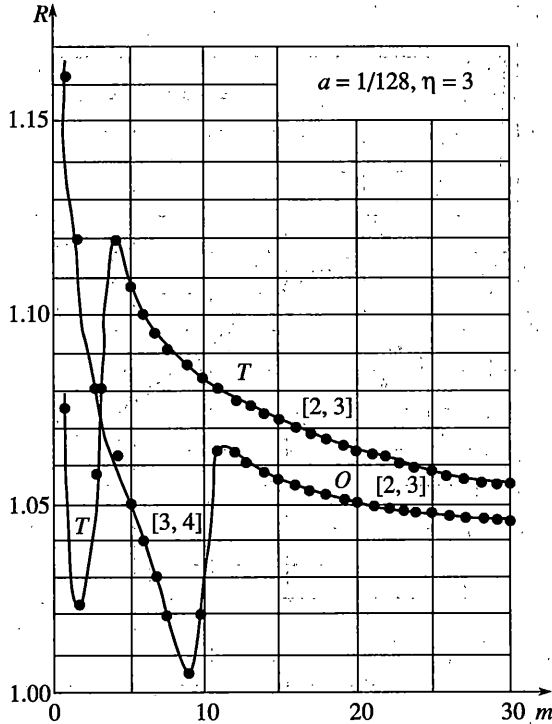
Случай III ($a = 0.1; \eta = 2$). Если исключить узкую область $1 \leq m \leq 5$ для обобщенной модели (эта область будет обсуждаться ниже), то результаты, представленные на фиг. 7, аналогичны в качественном отношении результатам на фиг. 6.

Случай IV ($a = 0.1; \eta = 3$). Развитие трещины происходит здесь по следующей схеме: модель Томсона

(0.0) → (0.1) → (0.2) → (1.1) → (1.2) → (2.1) → (2.2) → (3.1) и так далее

обобщенная модель

(0.0) → (0.1) → (0.2) → (0.3) → (1.2) → (2.1) → (2.2) → (3.1) и так далее



Фиг. 10

Таким образом, в зоне сцепления находится одна связь на восходящей ветви и две связи на нисходящей ветви, что характерно для обеих моделей. Смена механизма разрушения имеет место при $t = 6$ для модели Томсона и при $t = 10$ для обобщенной модели. При скачкообразном механизме разрушения в зоне сцепления находится одна связь, а нисходящие ветви перпендикулярны оси абсцисс. Следует отметить, что в районе $t = 6$ происходит переход от неравенства $R_T > R_{gen}$ для $t \leq 6$ к неравенству $R_{gen} > R_T$ для $t \geq 6$.

Случай V ($a = 1/128; \eta = 2$). Для модели Томсона характерна следующая схема формирования трещины: $(0.0) \rightarrow (0.1) \rightarrow (0.2) \rightarrow (0.3) \rightarrow (1.2) \rightarrow (1.3) \rightarrow (2.2) \rightarrow (3.1) \rightarrow (3.2) \rightarrow (4.1) \rightarrow (4.2)$ и так далее. Начиная с $t = 3$, развивается трещина с одной связью в области сцепления на восходящих ветвях и с двумя связями на нисходящих. Функция решеточного захвата монотонно убывает, а смена механизма разрушения имеет место при $t = 16$. Для обобщенной модели схема развития такова: $(0.0) \rightarrow (0.1) \rightarrow (0.2) \rightarrow (0.3) \rightarrow (1.2) \rightarrow (1.3) \rightarrow (2.2) \rightarrow (2.3) \rightarrow (3.2) \rightarrow (3.3) \rightarrow (4.2) \rightarrow (4.3) \rightarrow (5.2) \rightarrow (5.3) \rightarrow (6.2) \rightarrow (7.1) \rightarrow (7.2) \rightarrow (8.1) \rightarrow (8.2) \rightarrow (9.1)$ и так далее. Как видно, здесь имеют место две зоны сцепления: одна содержит от двух до трех связей для длин $1 \leq t \leq 5$, а другая содержит от одной до двух связей для длин $t \geq 7$. В интервале $5 \leq t \leq 7$ происходит перестройка одной зоны сцепления в другую. Смена механизма разрушения имеет место при $t = 28$. Во всей области длин трещин $R_T > R_{gen}$.

Случай VI ($a = 1/128; \eta = 3$). Как и в предыдущем случае, здесь имеют место две зоны сцепления. Одна – содержит от трех до четырех связей и достаточно ясно выражена для обобщенной модели ($2 \leq t \leq 9$). Другая – содержит от двух до трех связей.

Следует отметить, что эволюция трещин с двумя зонами сцепления достаточно ясно выражена для обобщенной модели в вариантах $a = 1/128, \eta = 3; a = 1/128, \eta = 2$ и $a = 0/1, \eta = 2$.

Для модели Томсона такая ситуация только обозначена в варианте $a = 1/128$, $\eta = 3$.

Для всех этих вариантов характерно, что трещина с большей длиной зоны сцепления реализуется на ранних стадиях развития (малые m), для этих трещин зависимость функции решеточного захвата R от длины трещины является очень резкой, а величина R опускается до значений близких к единице. Например, $R = 1.004$ при $m = 9$ для $a = 1/128$, $\eta = 3$. Подчеркнем, что участки зависимости $P = P(m)$, отвечающие такой эволюции трещин (см. фиг. 4), являются монотонно убывающими, хотя и кусочно-линейными (так сказать, “причесанная” спина динозавра). Последнее означает, что на этих участках при движении трещины вперед нет энергетического барьера и решеточный захват по существу отсутствует, хотя функция R и может быть формально определена по формуле (4.2). Описанную ситуацию можно, по-видимому, трактовать как образование трещины-зародыша. Если при каких-то внешних условиях образуется трещина $m = 2$ с длиной зоны сцепления [3, 4] (см. фиг. 10), то она безбарьерно дорастает до длины $m = 9$. Длина зародышевой трещины $m = 5$ имеет место при условиях $a = 1/128$, $\eta = 2$, а $m = 3$ имеет место при условиях $a = 0.1$, $\eta = 2$. В модели Томсона зародышевая трещина практически отсутствует (исключение: $m = 2$, [3, 4] при $a = 1/128$, $\eta = 3$).

Дальнейшая эволюция трещины связана с перестройкой зоны сцепления. Например, при $a = 1/128$, $\eta = 3$, начиная с $m = 11$ зона сцепления имеет длину [2, 3]. Соответствующий участок зависимости $P = P(m)$ становится немонотонным, движение трещины как вперед, так и назад связано с преодолением энергетического барьера и функция решеточного захвата медленно убывает с ростом трещины.

Заканчивая обсуждение полученных результатов, отметим следующие важные моменты.

I. Именно использование обобщенной модели позволяет четко установить двухступенчатый механизм эволюции трещины – сначала образование зародышевой трещины, а затем перестройка области сцепления и дальнейший рост при медленном убывании функции решеточного захвата.

II. Как правило, функция решеточного захвата в модели Томсона больше таковой в обобщенной модели.

III. Величина R падает по мере уменьшения α и увеличения η .

IV. Смена механизма разрушения происходит при все больших значениях m (длинах трещины) по мере уменьшения α и увеличения η .

Отметим, что полученные результаты показывают, что в рамках рассмотренной обобщенной модели Томсона размер концевых областей трещины наномасштабов составляет примерно 0.05–0.15 от длины трещины. Это соотношение близко к обычно принимаемому в теории трещин хрупкого разрушения.

Представляет интерес выяснить, не приведет ли к каким-то новым качественным эффектам дальнейшее увеличение числа атомных цепочек в кристалле с трещиной.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН № 13 “Развитие механики многомасштабного (от нано- к макромасштабам) деформирования и разрушения как основы проектирования новых материалов с повышенными эксплуатационными характеристиками”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баренблатт Г.И. О равновесных трещинах, образующихся при хрупком разрушении // ПММ. 1959. Т. 23. Вып. 3. С. 434–444. (Общие представления и гипотезы. Осесимметричные трещины); Вып. 4. С. 706–721. (Прямолинейные трещины в плоских пластинках); Вып. 5. С. 893–900. (Устойчивость изолированных трещин. Связь с энергетическими теориями).
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.* Развитие найдрібніших тріщин в твердому тілі // Прикл. механіка. 1959. Т. 5. Вып. 4. С. 391–401.
4. *Томсон Р.* Физика разрушения // Атомистика разрушения / Под ред. Р.В. Гольдштейна. М.: Мир, 1987. С. 104–144.
5. *Fuller E.R., Thomson R.M.* Lattice theories of fracture // Fracture Mechanics of Ceramics / Ed. R.C.Brandt. N.Y.: Plenum Press, 1978. V. 4. P. 507–548.
6. *Морозов Н.Ф., Паукишто М.В.* Дискретные и гибридные модели механики разрушения. СПб.: Изд-во СПб ун-та, 1995. 157 с.
7. *Гольдштейн Р.В., Шаталов Г.А.* О зоне сцепления вблизи края трещины при хрупком разрушении // Докл. РАН. 2003. Т. 389. № 5. С. 608–610.
8. *Гольдштейн Р.В., Шаталов Г.А.* Хрупкое разрушение в одномерной модели атомистической трещины // Изв. РАН. МТТ. 2003. № 3. С. 135–147.
9. *Thomson R., Hsiek C., Rana V.* Lattice trapping of fracture cracks // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. № 8. P. 3154–3160.
10. *Гельфонд А.О.* Исчисление конечных разностей. М.: Наука, 1967. 375 с.
11. *Гольдштейн Р.В., Шаталов Г.А.* Моделирование процессов разрушения в атомистической трещине нормального разрыва. Препринт № 710. М.: ИПМ РАН, 2002. 27 с.

Москва

Поступила в редакцию
20.07.2005