

05;11

## **Об анизотропии процессов пластической деформации и разрушения при динамическом нагружении**

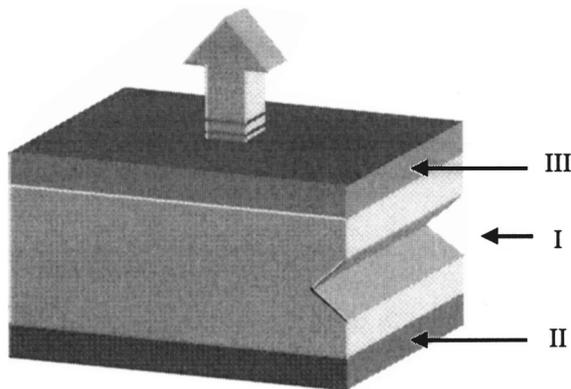
© К.П. Зольников, Т.Ю. Уваров, С.Г. Псахье

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск  
E-mail: uvarov@ispms.tsc.ru

Поступило в Редакцию 11 октября 2000 г.

На основе молекулярно-динамического моделирования исследовалось влияние анизотропии динамического нагружения на процессы пластической деформации и разрушения в кристаллите вблизи свободной поверхности. Показано, что существуют пороговые величины деформации, которые определяют раскрытие затравочной трещины и ее последующую остановку. Из результатов моделирования следует, что при нагружении в направлении  $[100]$  распространение трещины прекращается, после того как вблизи ее вершины начинает формироваться разупорядоченная область.

При изучении динамики пластической деформации гетерогенных материалов и их разрушения важным является понимание элементарных процессов зарождения и развития дислокаций и трещин. Для решения этих задач на атомном уровне широко используется молекулярно-динамическое моделирование. Так, распространение микротрещин в двумерных кристаллических структурах проводилось в работе [1], где изучалась зависимость результатов моделирования от вида потенциалов межатомного взаимодействия, характер распределения микронапряжений в области вершин микротрещин, оценивались критические величины нагружения для раскрытия трещин и т. д. Моделирование проводилось



**Рис. 1.** Схема нагружения моделируемого кристаллита. Области I, II, III.

для микротрещин различной формы. В работе [2] на основе квазиконтинуальной модели изучались процессы возникновения и распространения микротрещин при наличии в кристаллите межзеренных границ, рассчитывался коэффициент интенсивности критического нагружения, которое приводит либо к хрупкому разрушению материала, либо к испусканию дислокаций из вершины трещины. При этом было указано, что эффекты нелинейности играют важную роль при описании процессов формирования дислокаций вблизи вершины трещины. Следует отметить, что, как правило, в подобных работах не проводится изучения влияния свободной поверхности. В то же время в работах [3,4] было показано, что границы раздела, и в частности свободная поверхность, оказывают существенное влияние на процессы пластической деформации и разрушения.

Исходя из этого, в настоящей работе на основе метода молекулярной динамики исследовалось поведение (в условиях динамического нагружения) кристаллита со свободными поверхностями, содержащего области с несоразмерной деформацией. Особое внимание обращалось на исследование анизотропии отклика образца, с этой целью одноосное растяжение моделировалось вдоль кристаллографических направлений [100] и [110]. Моделируемый образец имел форму параллелепипеда, состоящего из трех областей, две из которых имитировали области контакта с недеформируемыми включениями (на рис. 1 они выделены

более темным цветом). При этом одна из недеформируемых областей (в дальнейшем будем называть ее захватом) двигалась с постоянной скоростью, а другая (подложка) — была фиксирована. Вдоль двух других направлений кристаллита моделировались периодические граничные условия и свободные поверхности. Такая модель позволяет на микроскопическом уровне изучать особенности поведения фрагментов композиционных материалов с жесткими включениями. Скорость растяжения варьировалась в интервале от 10 до 100 м/с.

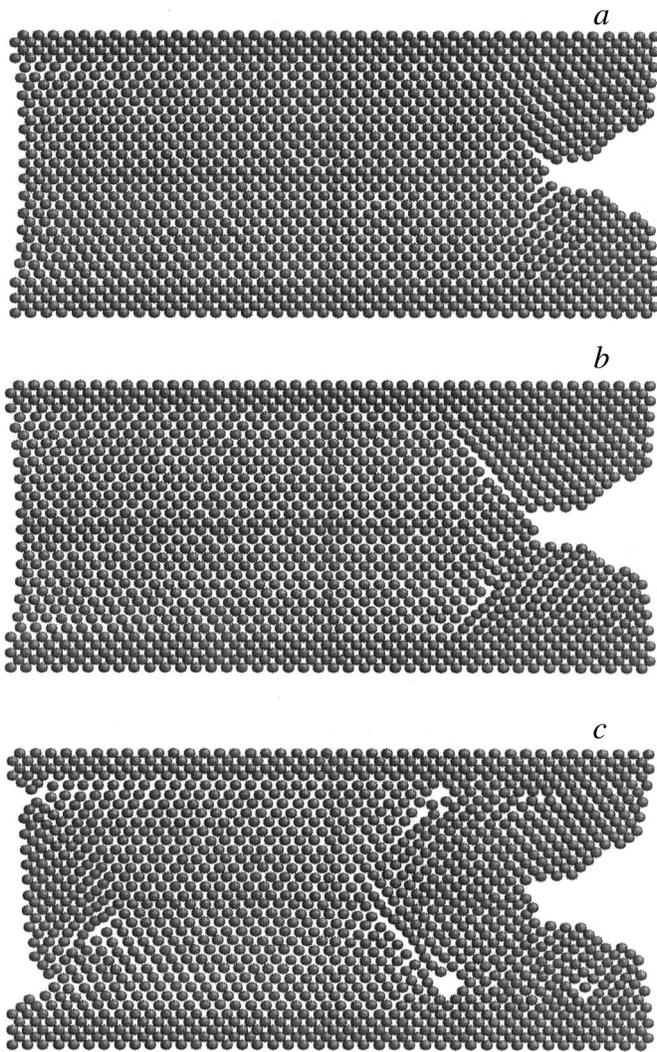
Моделировался кристаллит меди, содержащий более 8000 атомов. Для изучения зарождения и распространения трещин, возникающих при одноосном растяжении, на одной из свободных поверхностей была создана "затравочная" трещина (рис. 1). Затравочная трещина имела форму треугольной канавки вдоль всей свободной поверхности.

Для описания межатомного взаимодействия использовались многочастичные потенциалы, рассчитанные в рамках метода погруженного атома [5,6]. Используемые потенциалы позволяют описывать многие структурные, механические и энергетические свойства не только самого материала, но и его свободных поверхностей.

В работах [7,8] показано, что динамическое растяжение вдоль кристаллографического направления [100] приводит к фрагментации моделируемого кристаллита. Последующий анализ показал, что формированию блоков предшествует появление вихреобразного движения атомов в граничной зоне областей с несоразмерной деформацией. Диаметр вихрей составляет величину порядка 10 параметров решетки. Отметим, что именно вихревое движение обуславливает интенсивные атомные смещения вблизи свободной поверхности. Таким образом, фрагментация начинается в приповерхностной области и может осуществляться как за счет подстраивания граничных атомов под структуру одного из уже возникшего фрагмента, так и за счет роста и объединения фрагментов. Как показано в [7,8], углы разориентации фрагментов могут достигать десятков градусов.

Анализ эволюции системы показал, что при растяжении кристаллита вдоль направления [100] раскрытие затравочной трещины прекращается после того, как она "упирается" в один из блоков, который представляет собой развернутую относительно первоначальной ориентации область кристаллита. Далее в зоне контакта вершины трещины с блоком формируется разупорядоченная область.

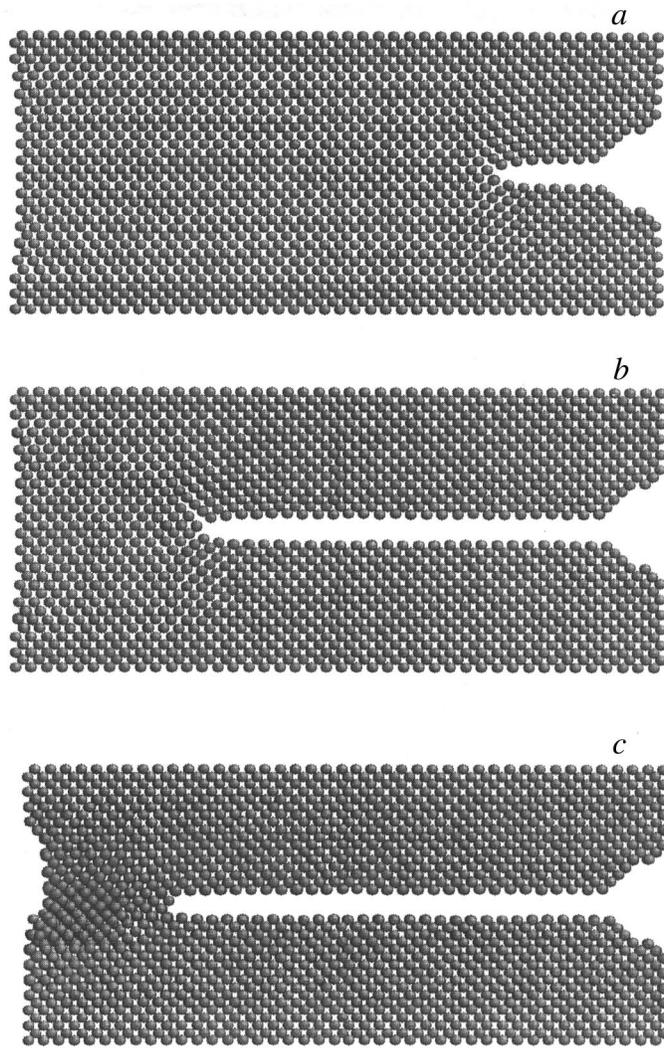
1\* Письма в ЖТФ, 2001, том 27, вып. 7



**Рис. 2.** Эволюция структуры кристаллита при растяжении вдоль направления  $[110]$  со скоростью 100 м/с.

Существенно отличный характер отклика материала был выявлен при моделировании растяжения кристаллита вдоль направления [110]. В частности, отсутствует фрагментация моделируемого кристаллита. Результаты моделирования показали, что начальный момент раскрытия трещины, так же как и ее остановка, слабо зависят от скорости нагружения и в значительной степени определяются степенью деформации моделируемого образца. Для данного направления нагружения и данной геометрии образца раскрытие трещины начинается при относительной деформации 8.5%, а остановка происходит при достижении пороговой деформации 11.5% (рис. 2, *a*). Далее аккомодация материала осуществляется излучением дислокаций из вершины трещины (рис. 2, *b*). Испущенные дислокации распространяются под углом 45° по отношению к направлению нагружения. В результате вблизи границ областей с несоразмерной деформацией начинается формирование микропор (рис. 2, *c*).

Хотя скорость деформации слабо влияет на начальный момент раскрытия и на остановку трещины, она оказывает существенное влияние на скорость ее распространения. Так, например, при увеличении скорости нагружения с 1 до 100 м/с максимальная скорость распространения трещины увеличивается практически в три раза (с 200 до 600 м/с). В связи с тем что пороговые значения деформации, при которых трещина стартует и останавливается, почти не зависят от скорости нагружения, глубина ее проникновения при разных скоростях нагружения будет определяться соотношением  $\Delta V_c / \Delta V_1$ , где  $\Delta V_c$  — среднее изменение скорости распространения трещины при увеличении скорости нагружения  $V_1$  на величину  $\Delta V_1$ . Если вышеуказанное соотношение близко к единице, то глубина проникновения затравочной трещины не изменяется при увеличении скорости деформирования, если же данное соотношение меньше единицы, то глубина проникновения будет уменьшаться. При этом уменьшение будет все более значительным, чем ближе это соотношение будет к нулю. В нашем случае при увеличении внешнего нагружения от 1 до 100 м/с скорость распространения трещины увеличивается с 200 до 600 м/с, а значит это соотношение будет примерно равно 0.03. Отметим, что определение средней скорости распространения трещины является достаточно трудной задачей, так как ее движение неравномерно и характеризуется значительными временными ускорениями. Глубина проникновения трещины для нашего случая уменьшается с ростом скорости деформации, что хорошо видно из сравнения на рис. 2, *c* и рис. 3. Следует отметить, что полному пробегу затравочной трещины



**Рис. 3.** Раскрытие трещины при растяжении кристаллита со скоростью 10 м/с вдоль направления [110].

(при данной деформации) через весь моделируемый кристаллит препятствуют возмущения, сформировавшиеся на противоположной к ней свободной поверхности.

Таким образом, проведенные расчеты показали: влияние свободной поверхности на распространение затравочной трещины носят выраженный анизотропный характер. Структурные перестройки зарождаются в зонах, расположенных вблизи свободной поверхности на границах раздела областей с несоразмерной деформацией. При нагружении материала вдоль направления [100] они приводят к процессу динамической фрагментации. Показано, что причиной остановки трещины (при нагружении вдоль [100]) является формирование разупорядоченной области при взаимодействии вершины трещины с одним из фрагментов. При нагружении вдоль кристаллографического направления [110] скорость распространения и глубина проникновения в материал трещины определяются как параметрами нагружения, так и критической деформацией, при которой в ее вершине начинают генерироваться дислокации. При этом может иметь место характерное хрупкое разрушение. Отметим, что эффекты, обусловленные влиянием свободной поверхности, проявляются наиболее явно в случаях нагружения моделируемого кристаллита вдоль направления [100], тогда как для направления [110] свободная поверхность начинает оказывать достаточно сильное воздействие по мере приближения к ней трещины.

## Список литературы

- [1] *Dienes G.P., Paskin A.* // J. Phys. Chem. Solids. 1987. V. 48. N 11. P. 1015–1033.
- [2] *Miller R., Ortiz M., Phillips R., Shenoy V., Tadmor E.B.* // Engineering Fracture Mechanics. 1998. V. 48. P. 427–444.
- [3] *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2 т. / Под ред. В.Е. Панина.* Новосибирск: Наука. 1995. 298 и 320 с.
- [4] *Панин В.Е.* // Физ. мезомех. 1999. Т. 2. № 6. С. 5–23.
- [5] *Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.* // Phys. Rev. 1986. V. B33. N 12. P. 7983–7991.
- [6] *Берч А.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В.* // Поверхность. 1994. № 6. С. 23–31.
- [7] *Псахье С.Г., Уваров Т.Ю., Зольников К.П.* // Физ. мезомех. 200. Т. 3. № 3. С. 69–71.
- [8] *Псахье С.Г., Уваров Т.Ю., Зольников К.П., Андержанов К.И., Руденский Г.Е.* // Физ. мезомех. 2000. Т. 3. № 4. С. 29–32.