

КОНФИГУРАЦИЯ АТОМНЫХ ПЛОСКОСТЕЙ, ОКАЙМЛЯЮЩИХ ТРЕЩИНУ, В МОДИФИЦИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ПАЙЕРЛСА — НАБАРРО

М. Х. Блехерман, В. Л. Инденбом

(Москва)

Исследуется зависимость конфигурации атомных плоскостей, окаймляющих трещину, от характера закона межплоскостного взаимодействия, для чего используется модель трещины, аналогичная модели Пайерлса — Набарро. Максимальное напряжение в вершине трещины непосредственно определяется силовым законом, а конфигурация трещины описывается гладкой функцией, удовлетворяющей нелинейному интегродифференциальному сингулярному уравнению (1.3). Предложен полубратный метод решения этого уравнения. Построены конфигурации атомных плоскостей, окаймляющих трещину, для серии законов межплоскостного взаимодействия.

Фундаментальной проблемой современной механики разрушения является анализ механизмов зарождения и развития трещин и связанных с этим вопросом задач о взаимодействии трещин с дислокациями, вакансиями и другими дефектами структуры. Известно, что трещина является мощным концентратором напряжений, поэтому при решении перечисленных задач необходимо учитывать специфику локальных упругих полей, возникающих в вершине трещины. Определение этих полей сводится к задаче о форме вершины трещины.

На микроскопическом уровне вопрос о форме трещины эквивалентен вопросу о конфигурации атомных плоскостей, окаймляющих трещину [1]. Под микроскопической трещиной обычно понимается участок, на котором атомные плоскости разведены на такое расстояние, что взаимодействие между ними носит существенно нелинейный характер. Для макроскопической трещины, кроме того, характерно наличие участка, на котором это расстояние столь велико, что взаимодействие практически отсутствует.

Если конфигурация атомных плоскостей известна из эксперимента, то, применяя метод, использованный в работе [2], можно решить обратную задачу, т. е. по заданной конфигурации восстановить закон взаимодействия атомных плоскостей, окаймляющих трещину. Цель данной работы заключается в исследовании прямой задачи, т. е. задачи о нахождении конфигурации атомных плоскостей, окаймляющих трещину, по заданному закону межплоскостного взаимодействия.

Решение этой задачи осложняется следующими факторами:

- 1) геометрической нелинейностью (конечностью деформаций);
- 2) нелинейностью силового закона $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\epsilon_{kl})$;
- 3) дискретностью реальной среды.

Ниже рассматривается некоторая специальная модель трещины [2], отличная от обычно используемой в линейной теории упругости.

1. Если предположить, что все нелинейные эффекты локализуются в тонком пограничном слое, окружающем трещину, то тело можно представить в виде двух линейно-упругих полупространств, разделенных в положении равновесия межатомным расстоянием a и взаимодействующих по некоторому нелинейному силовому закону $\sigma_1 = \sigma_1(u/a)$, где σ_1 — нормальная компонента тензора напряжений, u — относительное нормальное смещение границ полупространств.

Силовой закон трактуется здесь как закон взаимодействия атомных плоскостей, поэтому при малых смещениях должен выполняться закон Гука, т. е.

$$\left[\frac{d}{du} \sigma_1 \left(\frac{u}{a} \right) \right]_{u=0} = \frac{E}{a} \quad (E - \text{модуль Юнга}) \quad (1.1)$$

Площадь, ограниченная графиком силового закона, численно равна работе по отрыву атомных плоскостей, т. е. удвоенной плотности поверхностной энергии γ , поэтому силовой закон должен удовлетворять также условию

$$\int_0^\infty \sigma_1(u/a) du = 2\gamma \quad (1.2)$$

Если на части поверхности полупространств задано нормальное смещение $u_1(x)$, вызванное, например, объемным распределением сил или внедренным между полупространствами клином, то можно рассмотреть задачу о нахождении перемещений на остальной части поверхности, то есть задачу о конфигурации вершины трещины.

Уравнение равновесия трещины имеет вид

$$D \mathbf{H} \frac{du}{dx} = \sigma \left(\frac{u(x)}{a} \right) \quad \left(\mathbf{H} u(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(\xi) d\xi}{\xi - x} \right) \quad (1.3)$$

Здесь $\mathbf{H}$ — оператор преобразования Гильберта, $D = 1/4 E$ для плоского напряженного состояния, $D = E/4(1 - \nu^2)$ для плоского деформированного состояния, ν — коэффициент Пуассона. Под $\sigma(u(x)/a)$ понимается суммарное нормальное напряжение, построенное как функция $u(x)/a$.

Вводя безразмерное напряжение g , запишем уравнение (1.3) в виде

$$\mathbf{H} \frac{du}{dx} = g \left(\frac{u(x)}{a} \right) \quad \left(g \left(\frac{u(x)}{a} \right) = \frac{\sigma(u(x)/a)}{D} \right) \quad (1.4)$$

К аналогичной модели трещины пришли авторы работы [3], рассмотревшие в похожей постановке задачу с кусочно-линейным силовым законом.

2. Рассматриваемая модель аналогична известной в теории дислокаций модели Пайерлса — Набарро [4]. Рассмотрим тело, содержащее краевую дислокацию с вектором Бюргерса $b_y = B$ (фиг. 1). По Пайерлсу, тело представляется в виде двух линейно-упругих полупространств, причем плоскость раздела полупространств совпадает с плоскостью $x = 0$. Если рассматривать скольжение одного полупространства относительно другого, то касательное напряжение τ на краях полупространств должно быть периодической функцией относительного тангенциального смещения полупространств v .

Уравнение равновесия в модели Пайерлса — Набарро совпадает (с точностью до переобозначения координат) с уравнением (1.3) при замене в правой части σ на τ и замене под знаком интеграла u на v . В качестве силового закона Пайерлсом была выбрана функция

$$\tau = -GD \sin(Rv) \quad (G, R = \text{const})$$

В этом случае уравнение равновесия допускает эффективное решение

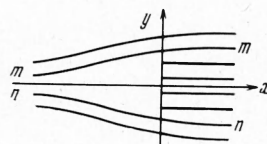
$$v = \frac{2}{R} \arctg(GRx)$$

Решение Пайерлса соответствует очень узким дислокациям; для моделирования более широких дислокаций можно воспользоваться обобщением решения Пайерлса — предложенным Форменом, Джесуоном и Вудом [4]. Видоизменив модель Пайерлса — Набарро, можно использовать ее для анализа формы атомных плоскостей, окаймляющих трещину. При этом разрез необходимо провести вдоль плоскости $y = 0$ (фиг. 1) и рассматривать не касательную, а нормальную компоненту тензора напряжений. В роли границ полупространств в этом случае выступают атомные плоскости $m - m$ и $n - n$. Таким образом, приходим к модели трещины, рассмотренной выше.

Как видно из фиг. 1, относительное нормальное смещение границ полупространств (т. е. плоскостей $m - m$ и $n - n$) должно удовлетворять условию

$$u(-\infty) = 0, \quad u(\infty) = B \quad (2.1)$$

Для окончательной постановки задачи кроме закона взаимодействия полупространств между собой необходимо задать закон взаимодействия между полупространствами и клином.



Фиг. 1

Однако нетрудно показать, что поверхностная энергия трещины, которая может быть записана в форме

$$\Gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{u(x)} \sigma du dx$$

не зависит от вида законов межплоскостного взаимодействия и взаимодействия между полупространствами и клином и равна $DB^2 / 2\pi$.

Для решения вопроса о конфигурации вершины макроскопической трещины достаточно аппроксимировать напряжения, создаваемые клином на поверхности полупространств, соблюдая при этом следующие условия: суммарная сила, действующая на полупространство, должна быть равна нулю, и, кроме того, эффекты, связанные с взаимодействием полупространств с клином и между собой, должны хорошо разделяться, т. е. конфигурация трещины в окрестности клина не должна влиять на конфигурацию в области нелинейного взаимодействия полупространств. Второе условие характерно для макроскопических трещин и тесно связано с условием автономности вершины трещины [5]. Из второго условия следует, что в области нелинейного взаимодействия полупространств функция $\sigma(u/a)$ будет совпадать с законом межплоскостного взаимодействия $\sigma_1(u/a)$.

В частности, можно предположить, что суммарное напряжение $\sigma(x)$ (в дальнейшем под $\sigma(u(x)/a)$ и $\sigma(x)$, так же как под $g(u(x)/a)$ и $g(x)$, будут пониматься одни и те же функции) является нечетной функцией относительно начала координат, которое выбрано таким образом, что $u(0) = 1/2 B$. (Систему координат на фиг. 1 при этом необходимо сдвинуть влево.) При таком выборе $\sigma(x)$ первое условие выполняется автоматически, выполнение второго условия будет проверено после нахождения решения.

Можно было бы попытаться продолжить аналогию между рассматриваемой моделью и моделью Пайерлса — Набарро и воспользоваться решением Формена, Джесуона и Вуда для анализа конфигурации атомных плоскостей, окаймляющих трещину. Однако это решение не обладает характерным для макротрещин участком, на котором практически отсутствуют напряжения. Получение серии решений, обладающих таким участком, и составляет основную математическую трудность рассматриваемой задачи.

3. Для преодоления этой трудности в дальнейшем будет использован полуобратный метод, основанный на интегральном представлении решения уравнения (1.4) для правой части произвольного вида. В качестве базы для построения этого решения будет взято линейно-упругое решение задачи о трещине.

В приближении теории упругости трещина рассматривается как математический разрез, берега которого свободны от напряжений. Для дальнейшего понадобится решение задачи о трещине, порожденной краевой дислокацией с вектором Бюргерса $b_y = B$, что эквивалентно внедрению в тело полубесконечного клина ширины B . Пусть трещина расположена в плоскости $z = 0$ между прямыми $x = -t$ и $x = t$. Тогда уравнение равновесия трещины может быть записано в виде

$$\frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{du/d\xi}{\xi - x} d\xi = g(x) \quad (3.1)$$

Так как берега трещины свободны от напряжений, то в правой части уравнения (3.1) необходимо положить $g(x) = 0$ при $|x| < t$. Граничные условия уравнения (3.1)

$$u(-t) = 0, \quad u(t) = B \quad (3.2)$$

Решение однородного уравнения (3.1) при учете (3.2) имеет вид [6]

$$\frac{du}{dx} = \operatorname{Re} \frac{B}{\pi \sqrt{t^2 - x^2}}, \quad g(x) = -\operatorname{Re} \frac{B}{\pi \sqrt{x^2 - t^2}} \operatorname{sgn} x \quad (3.3)$$

где Re обозначает действительную часть комплексно-значной функции.

Длина трещины $L = 2t$ может быть определена из энергетических соображений [7]

$$L = \frac{DB^2}{4\pi\gamma} \quad (3.4)$$

Формулы (3.3) показывают, что в приближении теории упругости вершина трещины приобретает параболическую форму, а напряжения в окрестности вершины обращаются в бесконечность, что свидетельствует о физической некорректности линейно-упругого приближения. Попытки устранить сингулярность в решении линейной теории упругости привели ряд авторов к необходимости учета сил взаимодействия берегов трещины [5, 8-10].

В рассматриваемой модели трещины вопрос о сингулярности отпадает автоматически: атомные плоскости всегда смыкаются плавно, причем гладкость закона межплоскостного взаимодействия обеспечивает соответствующую гладкость производной от перемещения. Следует отметить, что форма атомных плоскостей на приведенной в [2] электронно-микроскопической фотографии дислокационной трещины в пластинке фталоцианина меди разительно отличается от формы, ожидаемой на основе анализа решения (3.3): вершина трещины оказывается не выпуклой, а скорее вогнутой, более того, почти на всем протяжении трещины атомные плоскости имеют положительную кривизну, и лишь вблизи клина знак кривизны меняется на обратный.

4. Перейдем к построению представления решения уравнения (1.4). Если умножить правую часть первой из формул (3.3) на некоторую функцию $f(t)$ и проинтегрировать по t от $|x|$ до t_1 , то полученная функция также будет давать решение задачи о равновесии трещины, однако напряжение $g(x)$ на поверхности трещины будет, вообще говоря, отлично от нуля. Если $f(t) = 0$ на отрезке $[0, l]$, ($l < t_1$), то $g(x)$ также будет равно нулю на этом отрезке; если $f(t)$ мало на $[0, l]$, то $g(x)$ также будет мало. В рассматриваемом случае в качестве верхнего предела интегрирования следует брать $t_1 = \infty$.

Формально представление можно строить следующим образом. Введем комплексно-значную функцию действительного аргумента

$$\Phi_f(x) = \varphi(x) + i\psi(x) \quad (4.1)$$

$$\varphi(x) = \int_{|x|}^{\infty} \frac{f(t) dt}{\sqrt{t^2 - x^2}}, \quad \psi(x) = - \int_0^{|x|} \frac{f(t) dt}{\sqrt{x^2 - t^2}} \operatorname{sgn} x \quad (4.2)$$

Функция $f(t)$ предполагается такой, что интегралы (4.2) существуют всюду. Пользуясь формулами (3.1), (3.3), нетрудно проверить, что

$$\text{НФ}_f(x) = -i\Phi_f(x) \quad (4.3)$$

Можно доказать, что для всякой непрерывной функции $\kappa(x)$, убывающей на бесконечности не медленнее $Nx^{-\alpha}$ ($\alpha > 0$, N — произвольная постоянная), найдется пара функций $f^+(t)$ и $f^-(t)$ таких, что

$$\kappa(x) = \varphi^+(x) + \psi^-(x) \quad (\varphi^\pm(x) + i\psi^\pm(x) = \Phi_f^\pm(x)) \quad (4.4)$$

Действительно, рассмотрим выражения (4.2) как уравнения относительно функции $f(t)$. В силу четности и нечетности соответственно $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ решение достаточно получить при $x \geq 0$. Несложными подстановками эти уравнения приводятся к интегральным уравнениям Абеля [6], после чего решение выписывается в явном виде

$$f(t) = -\frac{2t}{\pi} \int_t^\infty \frac{d\varphi/dx}{\sqrt{x^2 - t^2}} dx, \quad f(t) = -\frac{2t}{\pi} \int_0^t \frac{d\psi/dx}{\sqrt{t^2 - x^2}} dx \quad (4.5)$$

Положим

$$\varphi^+(x) = 1/2 [\kappa(x) + \kappa(-x)], \quad \psi^-(x) = 1/2 [\kappa(x) - \kappa(-x)] \quad (4.6)$$

теперь искомые функции $f^+(t)$ и $f^-(t)$ найдутся соответственно из первой и второй формул (4.5). (Доказательство легко обобщить на случай разрывных $\kappa(x)$.)

Положим

$$du/dx = \varphi^+(x) + \psi^-(x) \quad (4.7)$$

В таком виде можно представить произвольную функцию, убывающую на бесконечности не медленнее степенной функции с произвольным отрицательным показателем.

Из (1.4) в силу (4.1), (4.3) вытекает

$$g(x) = \psi^+(x) - \varphi^-(x) \quad (4.8)$$

Таким образом, произвольное (в указанном выше классе) решение уравнения (1.4) можно представить в виде (4.7), (4.8). В дальнейшем эти формулы будут рассматриваться как параметрическая запись силового закона.

Упомянувшееся выше решение Пайерлса получается из формул (4.7), (4.8) при

$$f^+(t) = \frac{2G^2 R t}{(G^2 R^2 t^2 + 1)^{3/2}}, \quad f^-(t) = 0$$

Нетрудно также получить представление для решения Формена, Джесуона и Вуда.

Вернемся к рассматриваемой задаче. Для получения решения, содержащего лишь нечетное $g(x)$, положим $f^-(t) = 0$. Преобразуем граничные условия, предполагая, что $f^+(t)$ интегрируема на положительной полуоси. Условие (2.1) запишется в виде

$$\int_0^\infty f^+(t) dt = \frac{B}{\pi} \quad (4.9)$$

Аналогичный интеграл от $f^-(t)$ обращался бы в нуль из условия равенства нулю суммарной силы, действующей на тело.

Можно показать, что для выполнения условия (1.1) достаточно, чтобы при больших t

$$f^+(t) = \frac{BDa}{\pi E} \frac{1}{t^2} + o\left(\frac{1}{t^2}\right) \quad (4.10)$$

Условие (1.2) преобразуется к виду

$$\int_0^1 K(k') \int_0^\infty f^+(t) f^+(kt) dt dk = \frac{2\gamma}{D} \quad (4.11)$$

где $K(k)$ — полный эллиптический интеграл первого рода, $k' = \sqrt{1 - k^2}$ — дополнительный модуль. Запись условия (1.2) в виде (4.11) законна лишь для макроскопических трещин.

5. Задаваясь различными функциями $f^+(t)$, можно получить серию решений уравнения (1.4), соответствующих различным силовым законам. Для конкретного счета были выбраны следующие значения параметров:

$$D = E / 4 (1 - \nu^2), \quad \gamma = 1/8 \mu a, \quad B / a = 20, \quad \nu = 0,3$$

где μ — модуль сдвига.

Функция $f^+(t)$ бралась в виде ¹

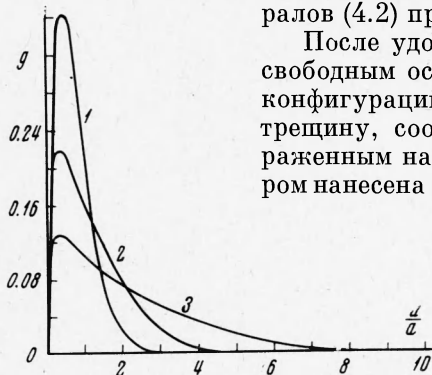
$$f^+(t) = \vartheta(b-t) A_0 \exp[-m^2(b-t)^2] + \vartheta(t-b) \frac{A_0 c^2}{(t-b)^2 + c^2}$$

где $\vartheta(t)$ — единичная функция Хевисайда.

При этом условия (4.9), (4.10) удовлетворяются аналитически, удовлетворение условию (4.11), а также вычисление интегралов (4.2) проводилось численно при помощи ЭВМ.

После удовлетворения условий (4.9), (4.10), (4.11) свободным остается единственный параметр b . Серия конфигураций атомных плоскостей, окаймляющих трещину, соответствующая силовым законам, изображенным на фиг. 2, приведена на фиг. 3. Пунктиром нанесена конфигурация, соответствующая $f^+(t) = S' \delta(t-s)$, ($\delta(t)$ — дельта-функция Дирака). Значения S и s были определены из условий (1.2), (2.1). Условию (1.1) при таком выборе $f^+(t)$ удовлетворить, естественно, нельзя.

Введем эффективную длину трещины L^* как удвоенное расстояние от начала координат до точки перегиба на графике относительного нормаль-

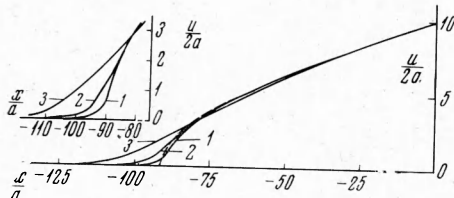


Фиг. 2

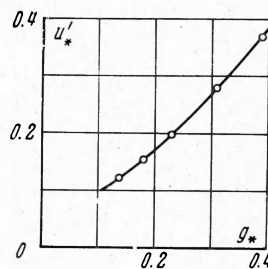
ного смещения $u(x)$. Из фиг. 3 следует, что L^* практически не зависит от вида силового закона и совпадает с равновесной длиной трещины L , определенной в континуальном линейно-упругом приближении. Этот результат совершенно естественен: задача об определении длины трещины является существенно однопараметрической (единственным параметром служит плотность поверхностной энергии γ), поэтому при корректном определении равновесная длина трещины не должна зависеть от используемой модели. На фиг. 3 видно также, что конфигурации трещины, соответствующие различным силовым законам, мало отличаются на большей части эффективной длины, и основное различие наблюдается в окрестности точки $x = -1/2 L^*$. Это свидетельствует о том, что конкретный вид

¹ При таком выборе $f^+(t)$ возникает трудность, связанная с тем, что $f^+(t)$ должна в нуле обращаться в нуль вместе со своей производной. Если параметр b выбран таким образом, что $\exp(-m^2 b^2) \ll 1$, то, практически не искажая вида функции $f^+(t)$, из нее можно вычесть поправку вида $A_1 / (t^3 + 1) + A_2 t / (t^4 + 1)$, где A_1 и A_2 выбираются из условия $f^+(0) = 0$, $[f^+(t)]_{t=0} = 0$.

силового закона отражается только на конфигурации вершины макротрещины, что подтверждает выполнение условия о независимости конфигурации вершины макротрещины от характера взаимодействия в окрестности клина.



Фиг. 3



Фиг. 4

В качестве характеристики перегиба можно выбрать максимальное значение производной от перемещения u'_* . На фиг. 4 приведена зависимость u'_* от максимального значения напряжения g_* для данной серии силовых законов. По мере приближения силового закона к кусочно-линейному следует ожидать неограниченного возрастания u'_* , так как в $u'(x)$ должна при этом появиться логарифмическая особенность.

В заключение необходимо отметить, что представление решения уравнения (1.3) может быть использовано для анализа формы микроскопических трещин, а также для изучения движения широких дислокаций.

Авторы благодарят Ю. Н. Работнова за внимание к работе и А. А. Штольберга за помощь при проведении численных расчетов.

Поступила 19 VIII 1969

ЛИТЕРАТУРА

1. Инденбом В. Л., Орлов А. Н. Физическая теория пластичности и прочности. Усп. физ. н., 1962, т. 76, вып. 3.
2. Блехерман М. Х., Нацвлишвили Г. И. О конфигурации атомных плоскостей, окаймляющих трещину. Кристаллография, 1969, т. 14, вып. 2.
3. Ентов В. М., Салганик Р. Л. К модели хрупкого разрушения Прандтля. Инж. ж. МТТ, 1968, № 6.
4. Коттрелл А. Теория дислокаций. М., «Мир», 1969.
5. Баренблатт Г. И. О равновесных трещинах, образующихся при хрупком разрушении. ПММ, 1959, т. 23, вып. 3—5.
6. Гахов Ф. Д. Краевые задачи. М., Физматгиз, 1963.
7. Инденбом В. Л. О критериях разрушения в дислокационных теориях прочности. Физ. твердого тела, 1961, т. 3, вып. 7.
8. Dugdale D. S. Yielding of steel sheets containing slits. J. Mech. Phys. Solids., 1960, vol. 8, No. 2.
9. Панасюк В. В. Предельное равновесие хрупких тел с трещинами. Киев. «Наукова думка», 1968.
10. Bilby B. A., Cottrell A. H., Swinden K. H. The Spread of plastic yield from a Notch. Proc. Roy. Soc., 1963, Ser. A, vol. 272, No. 1350.