

УДК 539.4, 519.6

СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ ВБЛИЗИ ОСТРОЙ ТРЕЩИНЫ С АНАЛИТИЧЕСКИМ РЕШЕНИЕМ ДЛЯ АНИЗОТРОПНЫХ МАТЕРИАЛОВ С КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИЕЙ

© Мушанкова К.А., Степанова Л.В.

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация*

e-mail: karinamushankova@yandex.ru

Понимание процесса разрушения требует детального моделирования распространения трещин в моно- и поликристаллических микроструктурах, учитывающего сложные явления на наноскопическом уровне. В работе было проведено атомистическое моделирование полей напряжений вблизи вершины остроконечной трещины в анизотропных материалах при различных параметрах смешанности нагружения. Предметом исследования были пластины с центральной трещиной из материалов с кубической кристаллической решеткой, описываемые потенциалом погруженного атома, а именно, ГЦК-медь и ГЦК-алюминий. На рис. –3 приведены поля напряжений для ГЦК-меди при приложении к пластинке растягивающей нагрузки 80 ГПа, сдвиговой 33.14 ГПа, то есть при параметре смешанности нагружения, равном 0.75.

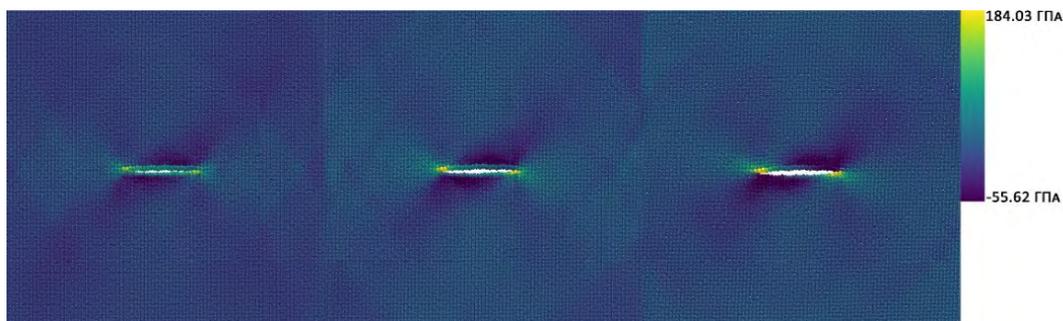


Рисунок 1 – Визуализация компоненты тензора механических напряжений σ_{11} для временных шагов, равных 2.5 пс, 4 пс, 5.5 пс

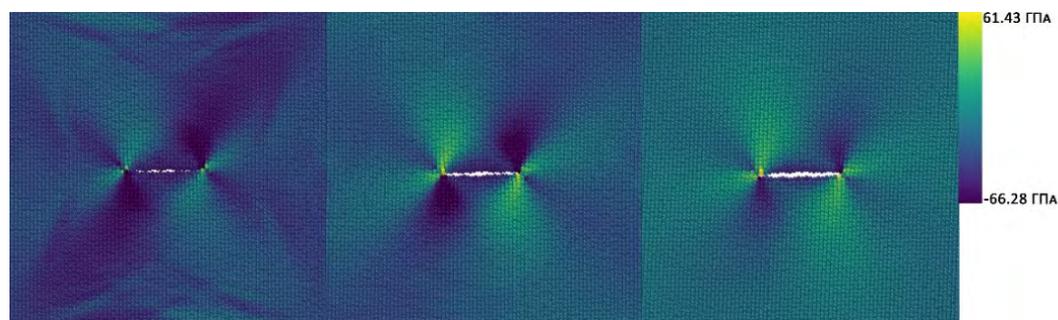


Рисунок 2 – Визуализация компоненты тензора механических напряжений σ_{12} для временных шагов, равных 2.5 пс, 4 пс, 5.5 пс

Затем было выполнено сопоставление асимптотического решения, учитывающего анизотропию материала [1], и результатов, полученных в рамках

атомистического подхода (рис. 4, 5). На рис. 4, 5 точками показано молекулярно-динамическое распределение напряжений, сплошной линией продемонстрировано точное аналитическое решение задачи о деформировании анизотропной плоскости с математическим разрезом.

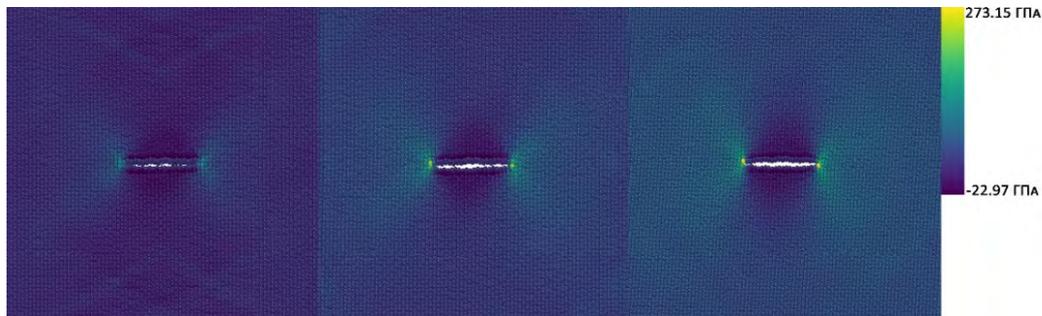


Рисунок 3 – Визуализация компоненты тензора механических напряжений σ_{22} для временных шагов, равных 2.5 пс, 4 пс, 5.5 пс

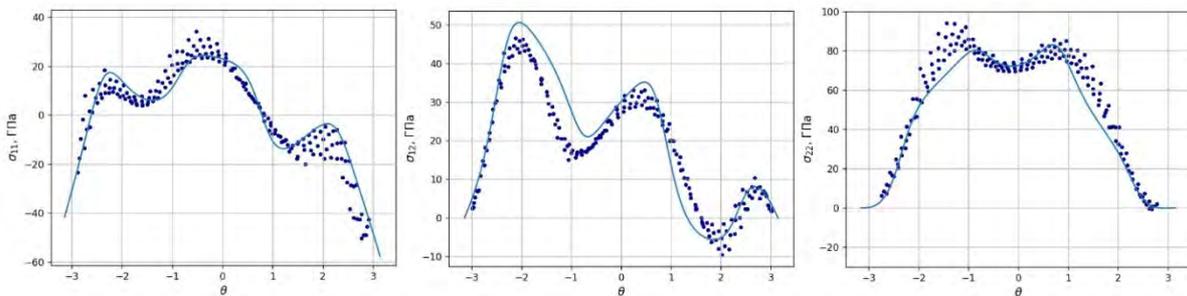


Рисунок 4 – Зависимость компонент тензора механических напряжений от полярного угла для ГЦК-меди

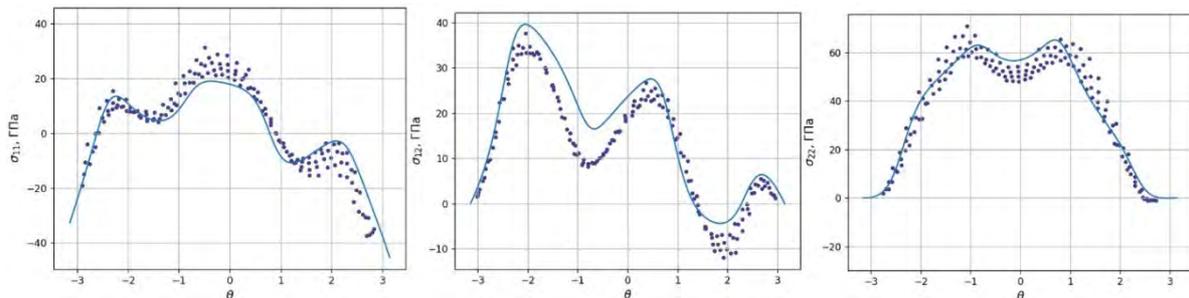


Рисунок 5 – Зависимость компонент тензора механических напряжений от полярного угла для ГЦК-алюминия

Аналогичные эксперименты были проведены для параметров смешанности нагружения $M_c = 0.25, 0.5, 1.0$. По результатам проведенных исследований можно сказать, что наблюдается качественное и количественное соответствие аналитического и атомистического решений для различных материалов с гранцентрированной кубической кристаллической решеткой как при нормальном отрыве, так и при смешанном нагружении [2]. На основании проведенного молекулярно-динамического моделирования можно сделать вывод, что параметры математической теории разрушения, характеризующие процесс разрушения на макроскопическом уровне, могут служить величинами, описывающими разрушение на наноскопическом уровне, обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений, входящие в аналитическое

решение, могут служить «мостом», связывающим принципиально различные описания явления разрушения на двух различных масштабных уровнях.

Авторы благодарят Российский научный фонд (проект № 21-11-00346).

Библиографический список

1. Nejati M., Ghouli S., Aytollahi M.R. Crack tip asymptotic fields in anisotropic planes: Importance of higher order terms // Applied Mathematical Modelling. 2021. Vol. 91. P. 837–862.
2. Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. 2022. Vol. 119. P. 103298.