

УДК 539.375

© 2003 г. В. М. Корнев

**РАЗРУШЕНИЕ ХРУПКИХ И ВЯЗКИХ КРИСТАЛЛОВ.
СИЛОВОЙ И ДЕФОРМАЦИОННЫЙ КРИТЕРИИ**

Изучаются рост и ветвление острых трещин в идеальных монокристаллах. Предлагаются силовой и деформационный критерии типа Нейбера – Новожилова ветвления острых трещин; эти критерии описывают хрупкое, квазихрупкое, квазивязкое и вязкое поведения материалов при разрушении. Для внутренних трещин получены простые соотношения, описывающие ветвление трещин, когда известны кривые теоретической прочности монокристалла типа Кулона–Мора для обобщенного напряженного состояния. Обнаружена возможность множественного ветвления трещин, что связывается с кратностью собственных значений при потере устойчивости системы. Установлено, что для идеальных монокристаллов выполняется принцип локальной симметрии в окрестности вершины трещины, если ось симметрии кристалла совпадает с осью трещины. Когда имеются несимметричные возмущения атомной решетки в окрестности вершины трещины или когда ось симметрии монокристалла не совпадает с осью трещины, принцип локальной симметрии нарушается.

1. Введение. Вопросы устойчивого роста острых трещин (или их ветвления) при некотором нагружении тела с прямолинейной острой трещиной представляют несомненный интерес. В окрестности вершины острой трещины нормального отрыва возникает сложное напряженно-деформированное состояние (НДС). При определенных условиях может происходить затупление острых трещин из-за больших сдвиговых напряжений и деформаций. Пока отсутствует определенный ответ на вопрос: является ли острая трещина отрыва устойчивой в идеальной кристаллической решетке Браве из-за наличия сдвиговых напряжений или сдвиговых деформаций в окрестности вершины трещины и как эта устойчивость связана с идеальной прочностью монокристалла на растяжение и сдвиг или предельной деформативностью кристаллической решетки при сдвиге?

Келли, Тайсон и Коттрелл [1–3] представили условие устойчивости для трещины отрыва в виде

$$\tau_{I\max}/\sigma_{I\max} < \tau_m/\sigma_m \quad (1.1)$$

Здесь τ_I и σ_I – сдвиговые и растягивающие напряжения, возникающие в окрестности вершины трещины нормального отрыва, τ_m и σ_m – теоретические (идеальные) прочности монокристалла на сдвиг и растяжение [4]. Качественные рассуждения сводились к следующему [1]: межатомная связь в вершине острой трещины должна растягиваться почти до критического состояния, но тогда в окрестности вершины трещины эти растягивающие напряжения будут преобразовываться (возможно только частично) в высокие сдвигающие напряжения, а так как теоретическая прочность на растяжение τ_m больше теоретической прочности на сдвиг σ_m , то возникает условие (1.1), налагаемое на притупление трещины. Это условие – типичный силовой критерий.

Райс и Томсон [2, 3, 5] предложили другое условие устойчивости для трещины отрыва в виде приближенного соотношения, если пренебречь реальной геометрией атомной решетки

$$Gb/\gamma \geq 10 \quad (1.2)$$

Здесь G – модуль сдвига, b – вектор Бюргерса дислокации, γ – поверхностная энергия материала. Критерий (1.2) получен из классических представлений физики твердого тела [5]: острая на атомном уровне трещина затупляется, когда из вершины трещины испускается дислокация. В отличие от силового критерия (1.1) критерий (1.2) – деформационный критерий. Подчеркнем, что затупление трещин по этим критериям может происходить, вообще говоря, в разных местах относительно вершины трещины.

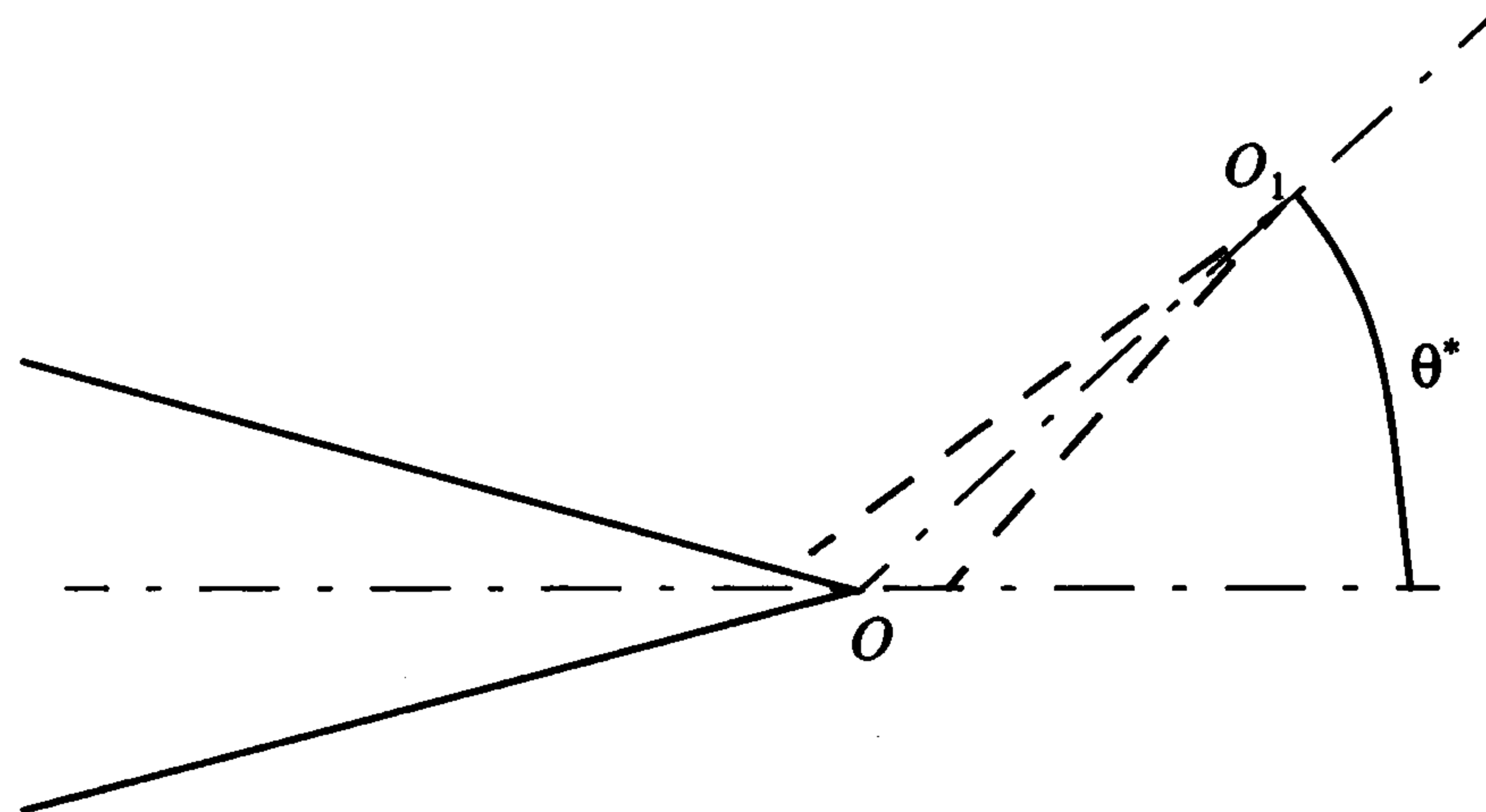
2. Напряженно-деформированное состояние в окрестности вершины трещины. В изотропном материале рассматривается внутренняя трещина, которая является острой на атомном уровне. Внутренняя прямолинейная трещина моделируется двусторонним разрезом длиной $2l$. Пусть для трещины нормального отрыва заданы на бесконечности напряжения σ_∞ . Будем рассматривать устойчивость роста острых трещин, подразумевая под этим проблему их ветвления.

На фиг. 1 изображена сплошной кривой правая вершина такой трещины в первом квадранте, а штриховая кривая – предполагаемое новое положение трещины при ветвлении, где $\pm\theta^*$ – углы ветвления для симметричного относительно трещины кристалла, точки O и O_1 соответствуют старому и новому положению вершин трещины при элементарном акте продвижения трещины. Ниже это ограничение, требующее наличие определенной симметрии кристалла относительно трещины-разреза, будет снято.

При $\theta^* = 0$ трещина распространяется устойчиво, оставаясь прямолинейной; при $\pm\theta^* \neq 0$ она ветвится, меняя свое направление, причем при $\theta^* = \pm\pi/2$ происходит затупление трещины при ее раскрытии. При хрупком разрушении материала [1–3, 5] трещина отрыва распространяется прямолинейно, т.е. $\theta^* = 0$. При вязком разрушении материала [1–3, 5] из вершины трещины испускаются две дислокации, что приводит к весьма эффективному затуплению вершины трещины, так как $\theta^* = \pm\pi/2$. Ниже будет показано, что возможно и квазихрупкое ($\theta^* \simeq \pm 0$) или квазивязкое ($\theta^* \simeq \pm\pi/2$) поведение материала, когда $\pm\theta^* \neq 0$, $\theta^* < \pi/2$. Подчеркнем, что заранее никакие ограничения, кроме симметрии, на поведение системы не накладываются (в отличие от существующих подходов [1, 2]). Поэтому, вообще говоря, возможны режимы, когда происходит множественное ветвление, когда, например, $\theta_{21}^* \neq \theta_{22}^* \neq \theta_{23}^*$ (нижние индексы соответствуют номеру материала и типу нагружения). Множественное ветвление связано как со сложностью НДС в окрестности вершины трещины, так и с прочностными характеристиками изотропного материала при сложном напряженном состоянии.

При описании ветвления трещин надо иметь информацию о поле напряжений в полярной системе координат $Or\theta$ для силового критерия, а для деформационного критерия при описании затупления трещин надо знать смещения берегов трещины в прямоугольной системе координат Oxy в окрестности вершины трещины. НДС и смещения берегов трещины в окрестности правой вершины трещины нормального отрыва можно выписать в виде ([6], с. 15–17)

$$\begin{aligned} \sigma_\theta(r, \theta) &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos^3 \frac{\theta}{2} + O(r^0) \\ \tau_{r\theta}(r, \theta) &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \sin \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} + O(r^0), \quad K_I = \sigma_\infty \sqrt{\pi l} \end{aligned} \quad (2.1)$$



Фиг. 1

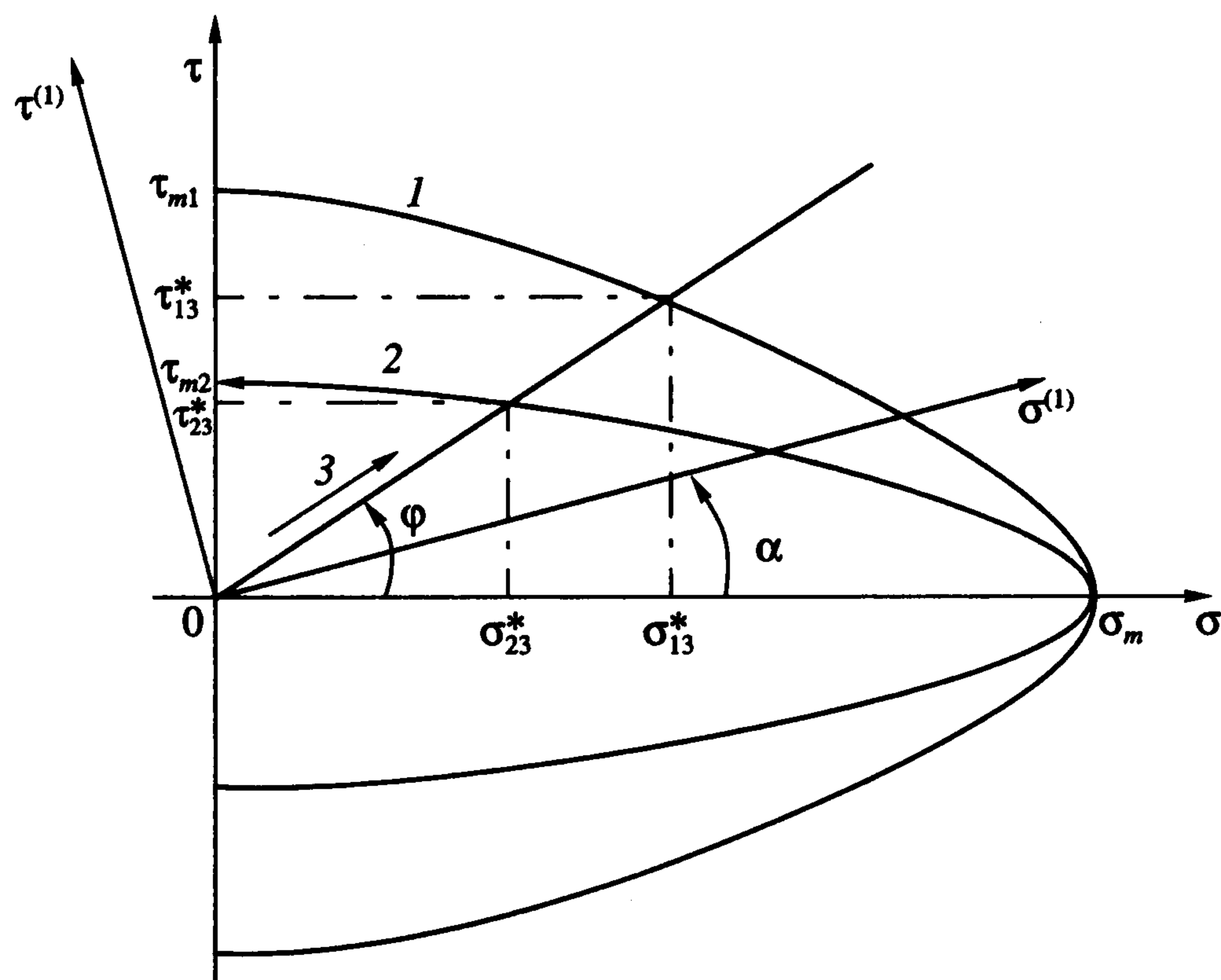
$$2\nu(x, 0) = \frac{\kappa + 1}{G} K_I \sqrt{\frac{|x|}{2\pi}} + O(x), \quad x \leq 0 \quad (2.2)$$

Здесь $\sigma_\theta(r, \theta)$ и $\tau_{r\theta}(r, \theta)$ – нормальные и сдвиговые напряжения, K_I – коэффициент интенсивности напряжений (КИН), $2\nu(x, 0)$ – раскрытие берегов трещины, G – модуль сдвига, $\kappa = 3 - 4\nu$ для плоской деформации, $\kappa = (3 - \nu)/(1 + \nu)$ для плоского напряженного состояния, где ν – коэффициент Пуассона. Согласно известным рекомендациям [7] целесообразно для кристаллов изучать плоскую деформацию. Поле напряжений (см. соотношение (2.1) и фиг. 1) определено в теле монокристалла (ср. с соотношением (1.1)), а раскрытие берегов трещины (см. соотношение (2.2) и фиг. 1) – вне тела монокристалла (ср. с соотношением (1.2)).

Изучим хрупковязкий переход при разрушении монокристаллов для достаточно длинных трещин, точнее, для трещин длиной $2l > 20 r_e$, где r_e – постоянная атомной решетки. При таких ограничениях соотношения (2.1), (2.2) можно упростить: члены $O(r^0)$ опускаются в соотношении (2.1), а члены $O(x)$ опускаются в соотношении (2.2). Далее будет использоваться подход Нейбера – Новожилова для материалов со структурой, за характерный линейный размер изотропного монокристалла выбирается постоянная атомной решетки r_e . Интервал осреднения при использовании этого подхода для идеального монокристалла равен r_e или $2r_e$ и совпадает с длиной отрезка OO_1 на фиг. 1.

3. Силовой и деформационный критерии. При постепенном возрастании напряжений σ_∞ имеем пропорциональное нагружение при сложном напряженном состоянии в окрестности вершины трещины, возможно ветвление трещины [8–10] или испускание дислокаций [11]. Выбор системой того или иного пути ветвления связан с прочностными характеристиками материала.

На фиг. 2 приведены кривые теоретической прочности монокристалла типа Кулона – Мора [12] для двух разных материалов и указан путь нагружения. Используются обозначения: σ и τ – нормальные и сдвигающие напряжения на рассматриваемой площадке при сложном напряженном состоянии, когда ось симметрии кристалла совпадает с разрезом; кривые 1 и 2 – кривые теоретической прочности симметричных относительно трещины монокристаллов, такие, что $\sigma_m = \sigma_{m1} = \sigma_{m2}$ – теоретические (идеальные) прочности монокристаллов на растяжение [4], а $\tau_{m1} \neq \tau_{m2}$ – теоретические (идеальные) прочности монокристаллов на сдвиг [4] (если теоретические прочности материалов на растяжение совпадают, то теоретические прочности материалов на сдвиг существенно различаются); цифрой три около стрелки показан пропорциональный путь нагружения; $\sigma^{(1)}$ и $\tau^{(1)}$ – нормальные и сдвигающие напряжения на рассматриваемой площадке при сложном напряженном состоянии, когда



Фиг. 2

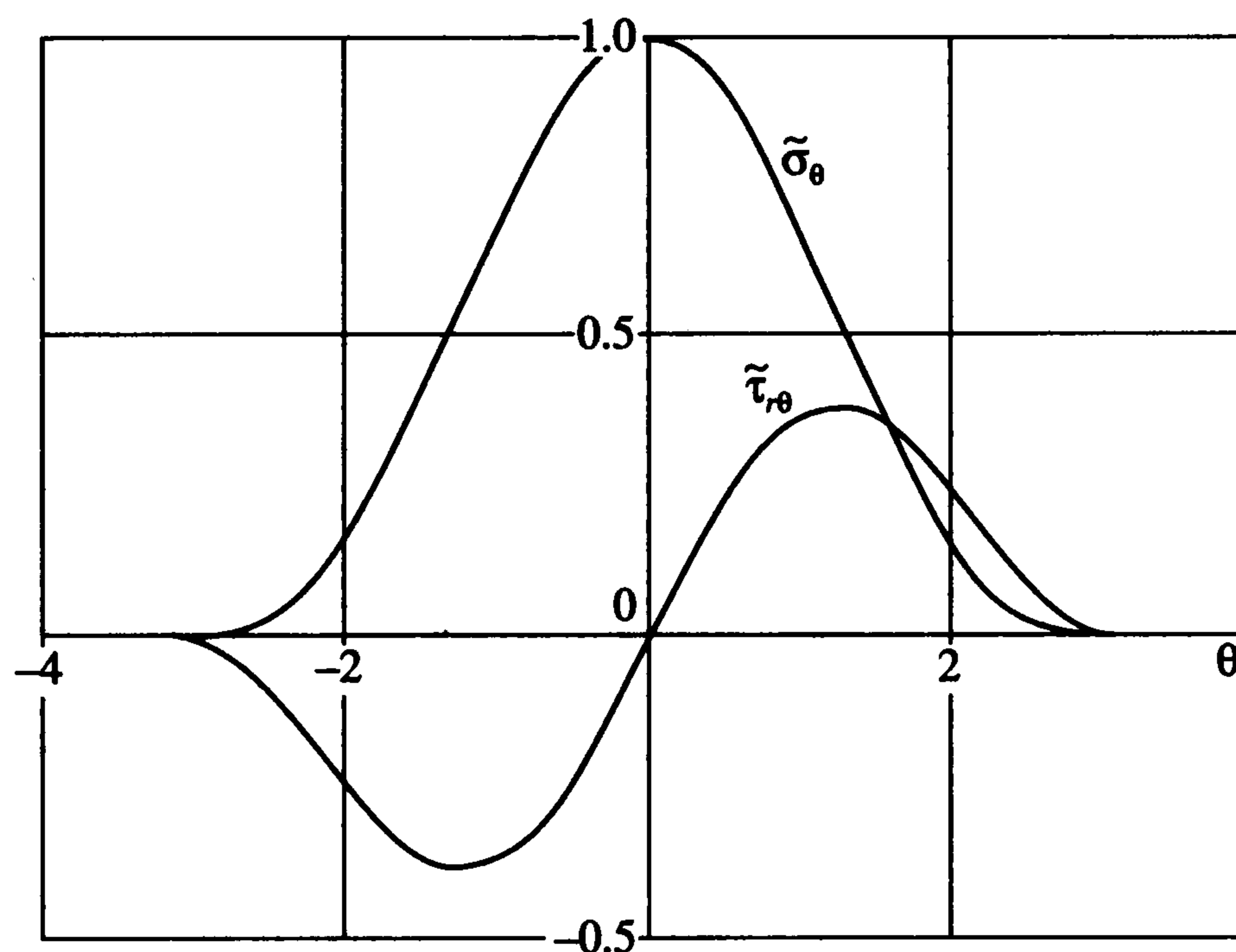
ни одна из осей симметрии кристалла не совпадает с разрезом; α – угол между осью симметрии кристалла и разрезом. Путь нагружения 3 характеризуется следующим соотношением: $\sigma_{13}^*/\tau_{13}^* = \sigma_{23}^*/\tau_{23}^* = C_3 = \text{const}$ (обозначения σ^* , τ^* используются для напряжений критических состояний с индексами, соответствующими номеру материала и типу нагружения); кроме постоянной C_3 путь нагружения можно задать углом φ . Эта постоянная C_3 или угол φ определяют тип нагружения, тип нагружения не зависит от прочностных характеристик материалов.

Силовой критерий. Пусть монокристалл, содержащий трещину, симметричен относительно трещины и не имеет других дефектов, например, вакансий. Рассмотрим силовой дискретно-интегральный критерий [8–10] хрупкой прочности типа Нейбера–Новожилова подрастания трещин по выбранным направлениям $\pm\theta$, определяемым углами ветвления (см. фиг. 1),

$$\langle \sigma_\theta(\theta) \rangle \leq \sigma^*, \quad \langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle \leq \tau^*$$

$$\langle \sigma_\theta(0) \rangle = \frac{1}{nr_e} \int_0^{nr_e} \sigma_\theta(r, \theta) dr, \quad \langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle = \frac{1}{nr_e} \int_0^{nr_e} \tau_{r\theta}(r, \theta) dr; \quad n = 1, 2 \quad (3.1)$$

Здесь $\langle \sigma_\theta(\theta) \rangle$, $\langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle$ – осредненные нормальные и сдвигающие напряжения на выбранных направлениях $\pm\theta$ в идеальном монокристалле. При $\langle \sigma_\theta(\theta) \rangle < \sigma^*$, $\langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle < \tau^*$ трещина не продвигается (ветвление отсутствует). Когда осредненные напряжения $\langle \sigma_\theta(\theta) \rangle$, $\langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle$ совпадают с напряжениями критических состояний σ^* , τ^* , выполняется критерий (3.1): на выбранных направлениях $\pm\theta^*$ происходит а) продвижение прямолинейной трещины на интервал осреднения, если $\theta^* = 0$ (ветвление отсутствует), б) ветвление внутренней трещины длиной $2l$, если $\theta^* \neq 0$, и вершина трещины из точки O квазистатически перемещается в точки O_1 и симметричную ей (см. фиг. 1). Когда произошло продвижение трещины при $\theta^* = 0$, критерий (3.1) применяется повторно к прямолинейной трещине длиной $2(l + nr_e)$ для оценки возможности ветвления новой трещины. Когда имеет место ветвление при $\theta^* \neq 0$, надо уточнить НДС для



Фиг. 3

трещины со сложным изломом, см., например, справочник [6] и работу [13], а также библиографию к ним, а затем повторить процедуру для оценки возможности ветвления трещины с изломами. Однако при $\theta^* \neq 0$ для трещины со сложным изломом НДС существенно усложняется, так как появляется кроме первой моды и вторая мода деформирования.

Оценим тип напряженного состояния в окрестности вершины трещины в зависимости от угла θ ($-\pi < \theta < \pi$). На фиг. 3 изображено распределение напряжений σ_θ , $\tau_{r\theta}$ в соответствии с упрощенными формулами (2.1), когда члены $O(r^0)$ опущены. Все величины отнесены к $K_I/\sqrt{2\pi r_0}$, где $r_0 = \text{const}$, т.е. $\tilde{\sigma}_\theta = \sigma_\theta/[K_I/\sqrt{2\pi r_0}]$, $\tilde{\tau}_{r\theta} = \tau_{r\theta}/[K_I/\sqrt{2\pi r_0}]$. Для некоторого угла θ выполняется соотношение

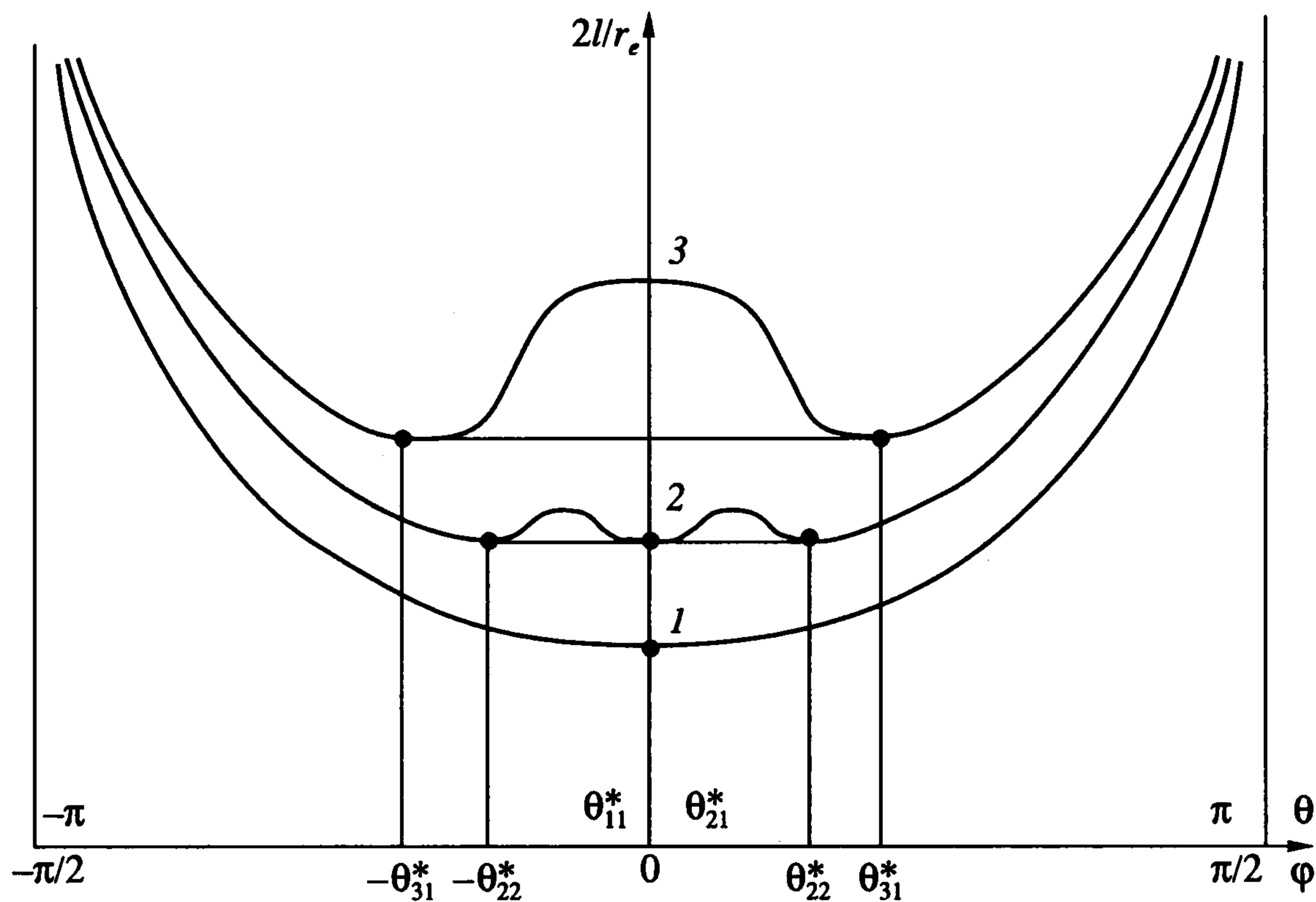
$$\tau_{r\theta}(r, \theta)/\sigma_\theta(r, \theta) = \langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle / \langle \sigma_\theta(\theta) \rangle = \text{tg}(\theta/2) \quad (3.2)$$

Итак, на продолжении трещины $\theta = 0$ реализуется чистое растяжение $\sigma_\theta \neq 0$, $\tau_{r\theta} = 0$; в малой окрестности берегов трещины при $\theta \rightarrow \pm\pi$ в окрестности ее вершины реализуется преимущественно сдвиговой характер НДС; при произвольных углах $-\pi < \theta < \pi$ имеет место обобщенное напряженное состояние $\sigma_\theta \neq 0$, $\tau_{r\theta} \neq 0$.

Пусть задан некоторый кристаллический материал, НДС которого после осреднения хорошо описывается уравнениями изотропной теории упругости, см. (2.1), (2.2). Когда ось симметрии кристалла совпадает с разрезом, предельная кривая прочности монокристалла типа Кулона–Мора на плоскости $\sigma - \tau$ описывается функцией $\rho(\varphi) = \rho(-\varphi) = f(\varphi) = f(-\varphi)$ (см. фиг. 2 и [12]), что можно связать с принципом локальной симметрии [14]. Тогда теоретические прочности монокристалла на разрыв и сдвиг соответственно равны $\sigma_m = f(0)$, $\tau_m = f(\pi/2)$, а напряжения критических состояний определяются следующим образом:

$$\sigma^* = f(\varphi)\cos\varphi, \quad \tau^* = f(\varphi)\sin\varphi; \quad \tau^*/\sigma^* = \text{tg}\varphi \quad (3.3)$$

Сравнивая соотношения (3.2) и (3.3), получим $\varphi = \theta/2$: при $\varphi = \theta/2 = 0$ – растяжение, при $\varphi = \theta/2 = \pi/2$ – сдвиг. Таким образом, очень легко перейти от типа нагружения в окрестности вершины трещины к типу нагружения на плоскости $\sigma - \tau$.



Фиг. 4

Проводятся необходимые преобразования в соотношениях (3.1)–(3.3), когда в равенствах (2.1) члены $O(r^0)$ опущены. Заметим, что использование первых или вторых соотношений из (2.1), (3.3) при пропорциональном нагружении приводит к одинаковым результатам [8–10]. Уравнения, описывающее ветвление внутренних трещин, имеют вид

$$\frac{2l(\theta)}{r_e} = \frac{nf^2(\theta/2)}{\sigma_\infty \cos^4(\theta/2)}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi; \quad \frac{2l(\varphi)}{r_e} = \frac{nf^2(\varphi)}{\sigma_\infty \cos^4 \varphi}, \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \quad (3.4)$$

Приведем качественные рассуждения, поясняющие функциональные зависимости (3.4) для достаточно гладких функций $f(\varphi)$ (разрывы первого рода отсутствуют). Напомним, что при $\varphi = 0$ имеет место чистое растяжение и $f(0) = \sigma_m > 0$, а при $\varphi = \pi/2$ – чистый сдвиг и $f(\pi/2) = \tau_m > 0$ (см. фиг. 2). Очевидно, что $l(0) > 0$ и $l(\varphi) \rightarrow \infty$ при $\varphi \rightarrow \pi/2$, причем $l'(\varphi) > 0$ при $\varphi \rightarrow \pi/2$. Воспользуемся результатами, приведенными в обзоре [4]. Относительные оценки теоретических прочностей на растяжение σ_m и сдвиг τ_m в отдельных случаях таковы [4]: 1) для кристаллов, склонных к раскалыванию, $\sigma_m \gtrsim \tau_m$; 2) для кристаллов, слабо сопротивляющихся испусканию дислокаций, $\sigma_m \gg \tau_m$. Оценим число экстремумов функции $l(\varphi)$ на интервале $(-\pi/2, \pi/2)$. Для первого случая при $l(\varphi) \approx \text{const}$ имеем минимум в точке $\varphi^* = 0$, т.е. трещина распространяется прямолинейно. Для второго случая $\sigma_m \gg \tau_m$ может появиться такой угол $\pm\varphi^*$, при котором $l'(\pm\varphi^*) = 0$, и возможна реализация трех соотношений: 2.1) $l(0) < l(\pm\varphi^*)$ (трещина распространяется прямолинейно), 2.2) $l(0) = l(\pm\varphi^*)$ (трехкратное ветвление трещины), 2.3) $l(0) > l(\pm\varphi^*)$ (двукратное ветвление трещины).

Полученные функциональные зависимости (3.4) критических длин трещин $2l/r_e$ от угла ветвления θ или вида напряженного состояния φ представлены на фиг. 4. Приведены три кривые, характеризующие ветвление трещин в различных материалах при заданном уровне нагружения σ_∞ : кривая 1 описывает поведение первого материала, для которого $\theta_{11}^* = 0$, кривая 2 – поведение второго материала, для которого

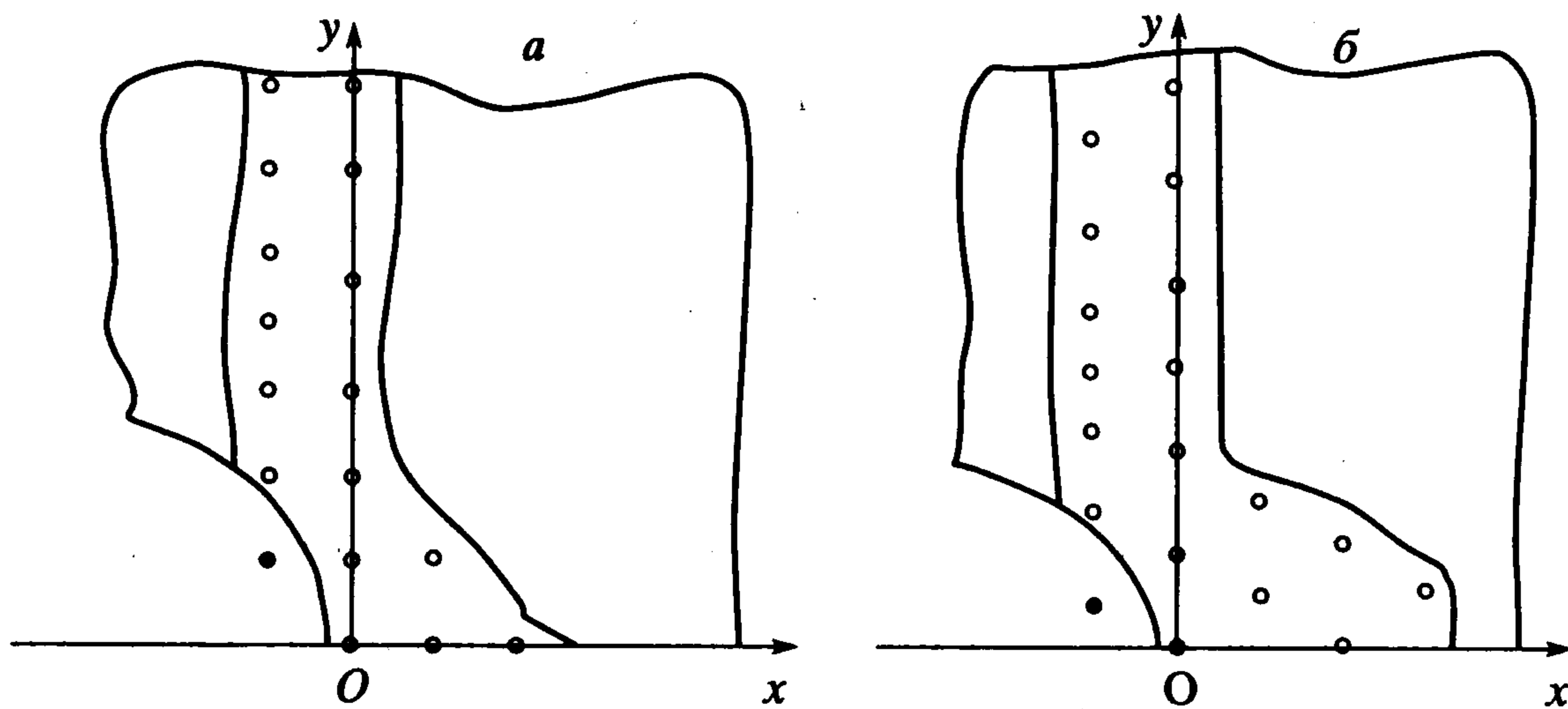
$\theta_{21}^* = 0, \pm\theta_{22}^* \neq 0$, кривая 3 – поведение третьего материала, для которого $\pm\theta_{31}^* \neq 0$. Различия в поведении материалов связаны с характеристиками прочности $f_i(\varphi)$ первого ($i = 1$), второго ($i = 2$) или третьего ($i = 3$) материалов. При заданном уровне нагружения σ_∞ для первого, второго или третьего материалов получаются критические длины трещин $l_1^*(\theta_{11}^*)$ (ветвление трещины отсутствует), $l_2^*(\theta_{21}^*) = l_2^*(+\theta_{22}^*) = l_2^*(-\theta_{22}^*)$ (трехкратное ветвление), $l_3^*(+\theta_{31}^*) = l_3^*(-\theta_{31}^*)$ (двукратное ветвление) соответственно, причем по силовому критерию критические длины трещин для этих материалов определяются так $l_i^* = \min l_i(\theta)$ при $i = 1, 2, 3$; этим критическим длинам l_i^* соответствуют углы ветвления $\theta_{11}^*; \theta_{21}^*, \theta_{22}^*; \theta_{31}^*$. Выполняется принцип локальной симметрии [14]. Заметим, что возможно проявление и более сложного поведения материалов, например множественное растрескивание. Если первый материал относится к хрупким материалам, так как $\theta_{11}^* = 0$, то третий материал ($\pm\theta_{31}^* \neq 0$ и $\theta_{31}^* < \pi/2$) ведет себя как квазихрупкий материал при $\theta_{31}^* \approx 0$, и как квазивязкий материал при $\theta_{31}^* \approx \pi/2$. Классифицировать второй материал затруднительно, когда $\theta_{11}^* = 0$ и $\theta_{22}^* \approx \pi/2$. Очевиден переход от критических длин внутренних трещин l_i^* к критическим КИН $K_{Ii}^* = \sigma_\infty \sqrt{\pi l_i^*}$ ($i = 1, 2, 3$).

Экспериментальные результаты [15] не противоречат принципу локальной симметрии [14] и приведенным рассуждениям; например, была приведена ([15], фиг. 7) микрофотография вершины ветвящейся трещины при множественном растрескивании керамики. Напомним, что критерий (3.1) связан с потерей устойчивости кристаллической решетки. Для первого материала ветвление трещины отсутствует (простое собственное значение), для второго материала имеет место трехкратное ветвление [15] (трехкратное собственное значение), для третьего материала – двукратное ветвление (двукратное собственное значение). Только для первого типа материала прямолинейная трещина распространяется устойчиво, так как не меняет своего направления при квазистатическом подрастании.

Переходим к интерпретации условия устойчивости (1.1). Уточним левую часть этого соотношения: воспользуемся соотношениями (2.1), пренебрегая в них членами $O(r^0)$. Очевидно, что напряжения σ_θ и τ_{θ} достигают экстремума при $\theta_\sigma = 0$ и $\theta_\tau = \pm 2 \arcsin(1/\sqrt{3})$ соответственно, т.е. в разных точках $\theta_\sigma \neq \theta_\tau$ (см. фиг. 3). При получении критерия (1.1) были приведены [1] качественные рассуждения при обосновании перехода от поля напряжений в окрестности вершины трещины к теоретической прочности материала как на растяжение, так и на сдвиг.

Итак, предложены более общие подходы при исследовании проблемы ветвления трещин, когда известна предельная кривая $\rho(\varphi) = \rho(-\varphi) = f(\varphi) = f(-\varphi)$ прочности материала типа Кулона–Мора, см. (3.1) и (3.4).

Деформационный критерий. Переходим к деформационному критерию для вязких материалов. Пусть монокристалл, содержащий внутреннюю трещину, симметричен относительно трещины и не имеет других дефектов, например, вакансий. При нагружении из вершины трещины симметрично могут испускаться две дислокации [5]. Примем во внимание реальную геометрию атомной решетки в окрестности вершины трещины [16] для плоского случая. Воспользуемся простейшей моделью дислокации Френкеля – Конторовой [11]. Эта модель характеризуется двумя геометрическими параметрами, которые будут использованы ниже: расстоянием между двумя слоями атомов r^* (это расстояние может не совпадать с постоянной атомной



Фиг. 5

решетки r_e), критическим смещением h_m . Пусть $\pm\beta$ – угол между нормалью к плоскости трещины и плоскостями, по которым испускаются дислокации ($-\pi/2 < \beta < \pi/2$). Реальная трещина, которая моделируется двусторонним разрезом, образована следующим образом: на линии трещины убраны все атомы; считается, что атомы, расположенные на берегах трещины, не взаимодействуют между собой. Закритические состояния систем после испускания двух дислокаций приведены на фиг. 5 для докритического расположения атомов в узлах квадратной решетки (а) и узлах плотноупакованного слоя атомов (б). В соотношении (2.2) за точку отсчета выбирается вершина трещины, а смещение берегов трещины оценивается на расстоянии $x = -r^* \cos \beta$ от ее вершины [11] (члены $O(x)$ в соотношении (2.2) опущены). Предлагается использовать деформационный критерий, описывающий симметричное испускание двух дислокаций из вершины внутренней трещины,

$$2\nu(-r^* \cos \beta, 0) = \frac{\kappa + 1}{G} K_I \sqrt{\frac{r^* \cos \beta}{2\pi}} \leq \frac{2h_m}{\cos \beta}, \quad K_I = \sigma_\infty \sqrt{\pi l} \quad (3.5)$$

где h_m – критическое смещение в атомной решетке при конкретной упаковке атомов, такое, что при деформировании системы при наличии геометрической и физической нелинейности превышена теоретическая прочность на сдвиг τ_m (см. [11]). Для критического смещения в плотно упакованном слое атомов были получены оценки [8 – 10] $h_m \approx (0, 3 \dots 0, 4) r_e$, конкретные величины h_m зависят от потенциалов межатомного взаимодействия.

При $\nu(-r^* \cos \beta, 0) < h_m / \cos \beta$ испускание дислокаций не происходит. Пусть выполнено ограничение $\langle \sigma_\theta(\theta) \rangle < \sigma^*$, $\langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle < \tau^*$ для критерия (3.1), тогда при выполнении деформационного критерия (3.5), когда $\nu(-r^* \cos \beta, 0) = h_m / \cos \beta$, имеет место весьма эффективное затупление трещины из-за испускания двух дислокаций (двукратное собственное значение). Для тупой трещины выполняется гипотеза С.А. Христиановича о конечности напряжений в вершине трещины [6]. Материалы, в которых трещина затупляется при испускании дислокаций, относятся либо к вязким при $\beta = 0$, либо к квазивязким при $\beta \approx 0$. Для рассматриваемых типов материалов из деформационного критерия (3.5) для критических КИН K_{li}^{**} и критических длин трещин l_i^{**} имеют место простые соотношения

$$K_{li}^{**} = \frac{2h_m}{\cos \beta} \frac{G}{\kappa + 1} \sqrt{\frac{2\pi}{r^* \cos \beta}}, \quad l_i^{**} = \frac{K_{li}^{**} \sigma_\infty}{\pi}; \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.6)$$

Трудно классифицировать материал при множественном растрескивании, когда одновременно выполняются силовой (3.1) и деформационный (3.5) критерии. Сомнительно $\langle \sigma_{\theta}(\theta) \rangle = \sigma^*$, $\langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle = \tau^*$, $\nu(-r^* \cos \beta, 0) = h_m / \cos \beta$, что подобный материал существует среди реальных материалов в виде идеальных монокристаллов; однако при наличии существенных возмущений атомной решетки перед вершиной трещины подобное поведение материала не исключено, см. ниже. Затупление трещин на атомном уровне было подробно описано [17, 18]. Однако в [17] отсутствуют простые выражения для критических параметров K_{Ii}^{**} , l_i^{**} , см. соотношения (3.6) После испускания дислокаций материал повреждается. Теперь в материале с повреждениями целесообразно рассматривать тупую трещину [18, 19], точнее узкий вырез с радиусом закругления в вершине. Эти радиусы закругления для систем, изображенных на фиг. 5, приближенно составляют $R \approx 1.5 r_e$ (а) и $R \approx 1.5 \sqrt{0.75} r_e$ (б).

Предлагаемый деформационный критерий (3.5) и его следствия (3.6) позволяют описать потерю устойчивости атомной решетки в окрестности вершины трещины при испускании дислокаций, введенный параметр критического смещения в атомной решетке h_m по физическому смыслу аналогичен энергетическому параметру, характеризующему потерю устойчивости атомной решетки [20]. Этот критерий, вероятно, проще, чем критерий из [20]; частично это связано с тем, что в критерии (3.5) используется более простая модель дислокации Френкеля – Конторовой [11], а не модель Пайерлса [20].

Сравнивая критические длины трещин l_i^* , l_i^{**} или критические КИН K_{Ii}^* , K_{Ii}^{**} соответственно по силовому (3.1) и деформационному (3.5) критериям, установим какой из этих критериев реализуется при ветвлении трещин ($i = 1, 2, 3$):

1) если $K_{Ii}^* < K_{Ii}^{**}$, $l_i^* < l_i^{**}$, то происходит ветвление трещин по силовому критерию без испускания дислокаций;

2) если $K_{Ii}^* > K_{Ii}^{**}$, $l_i^* > l_i^{**}$, то происходит испускание дислокаций по деформационному критерию;

3) если $K_{Ii}^* = K_{Ii}^{**}$, $l_i^* = l_i^{**}$, то имеет место как ветвление трещины по силовому критерию, так и испускание дислокаций по деформационному критерию.

4. Нарушение локального принципа симметрии. Выдвинутый локальный принцип симметрии [14], который широко использовался выше, может быть нарушен, если перейти от изучения идеальных решеток Браве для монокристаллов к более или менее реальным кристаллам [16]. Допустим, что

1) монокристалл кроме трещины имеет дефекты типа вакансий, дислокаций или примесных атомов, которые расположены произвольно относительно вершины трещины;

2) оси симметрии трещины и идеального монокристалла не совпадают.

Влияние возмущений. Пусть краевые дислокации расположены под произвольным углом к линии трещины в окрестности ее вершины. Уточним расположение вакансий и примесных атомов. Допустим, что монокристалл имеет дефекты атомной решетки типа единичных вакансий или единичных примесных атомов и кластеров из двух вакансий или двух примесных атомов в малой окрестности вершины трещины, причем вакансии или примесные атомы, нарушающие симметрию атомной решетки, не расположены на берегах трещины. Для примесных атомов предполагается, что величины постоянных кристаллических решеток основного материала r_e и примеси $r_e^{(1)}$ практически совпадают, т.е. $r_e \approx r_e^{(1)}$, существенное отличие связано с постоян-

ными межатомного взаимодействия [1]. Силовой и деформационный критерии запишутся в несколько ином виде

$$\langle \sigma_{\theta}(\theta) \rangle \leq \sigma^{**}, \quad \langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle \leq \tau^{**}, \quad \sigma^{**} = f^*(\varphi) \cos \varphi, \quad \tau^{**} = f^*(\varphi) \sin \varphi \quad (4.1)$$

$$v(-r^* \cos \beta, 0) \leq h_m^* / \cos \beta \quad (4.2)$$

Здесь σ^{**} , τ^{**} – напряжения критических состояний материала с дефектами, h_m^* – критическое смещение в атомной решетке с дефектами, при котором происходит потеря устойчивости. Из-за наличия дефектов меняется предельная кривая $\rho^*(\varphi) = f^*(\varphi)$ прочности материала типа Кулона–Мора на плоскости $\sigma - \tau$, причем в общем случае $\rho^*(\varphi) \neq \rho^*(-\varphi)$, причем эта функция $\rho^*(\varphi)$ может иметь разрывы первого рода. Таким образом, в модифицированных силовом (4.1) и деформационном (4.2) критериях меняются характеристики материала по сравнению с исходными критериями (3.1) и (3.5), см., например, (3.6).

Сравнительно легко получить оценки уменьшения прочности исходного материала, когда возмущения связаны только с вакансиями и известна предельная кривая для исходного идеального монокристалла $f(\varphi)$. Процедура осреднения выполняется с учетом реально действующих связей [18], тогда имеем оценки

$$\sigma^{**} \approx (k/n)\sigma^*, \quad \tau^{**} \approx (k/n)\tau^* \quad (4.3)$$

Здесь k – число межатомных связей, действующих на интервале осреднения nr_e , причем в изучаемом случае $k \geq 1$, $k \leq n \leq 4$. Появившееся число межатомных связей k зависит от угла θ , параметр k/n характеризует поврежденность материала (для идеального монокристалла $k/n = 1$). Для материала с примесными атомами надо построить кривую $\rho^*(\varphi) = f^*(\varphi)$ прочности материала типа Кулона–Мора; исследовалась [19] потеря устойчивости атомных цепочек с примесными атомами.

Принцип локальной симметрии [14] в системе с рассматриваемыми дефектами:

- 1) выполняется, если функция $f(\theta)^*$ четная;
- 2) нарушен, когда функция $f(\theta)^*$ не является четной.

При наличии существенных повреждений перед вершиной трещины, когда параметр поврежденности k/n существенно меньше единицы, см. (4.3), и при отсутствии других повреждений, вероятно, может реализоваться случай одновременного выполнения критериев (4.1), (4.2); такой материал затруднительно классифицировать. Обсуждалось распространение трещин в хрупком и квазихрупком материалах при наличии дефектов [21].

Рассогласование осей идеального монокристалла и трещины. Допустим, что ось симметрии идеального монокристалла развернута на некоторый угол $\alpha \neq 0$ относительно разреза (безусловно надо договориться о знаке сдвигающих напряжений τ). Пусть в новых осях $\sigma^{(1)} - \tau^{(1)}$, см. фиг. 2, предельная кривая прочности монокристалла типа Кулона–Мора описывается функцией $\rho(\varphi - \alpha) = f(\varphi - \alpha)$.

Силовой критерий (4.1) формально сохраняет свой вид, если напряжения критических состояний σ^{**} , τ^{**} определить соответствующим образом, а именно,

$$\langle \sigma_{\theta}(\theta) \rangle \leq \sigma^{**}, \quad \langle \tau_{r\theta}(\theta) \rangle \leq \tau^{**}, \quad \sigma^{**} = f(\varphi - \alpha) \cos(\varphi - \alpha) \quad (4.4)$$

$$\tau^{**} = f(\varphi - \alpha) \sin(\varphi - \alpha)$$

Функциональная зависимость критических длин трещин $2l(\varphi)/r_e$ отличается от (3.4) из-за наличия угла $\alpha \neq 0$.

Деформационный критерий приобретает вид

$$v(-r^* \cos \beta^{\pm}, 0) \leq h_m^* / \cos \beta^{\pm} \quad (4.5)$$

поскольку углы между нормалью к плоскости трещины и плоскостями, по которым выпускаются дислокации выше и ниже плоскости трещины, не совпадают по абсолютной величине, т.е. $\beta^+ \neq |\beta^-|$.

Очевидно, что имеет место нарушение локального принципа симметрии [14] и для силового (4.4), и для деформационного (4.5) критериев, так как $f(\varphi - \alpha) \neq f(-\varphi + \alpha)$ и $\beta^+ \neq |\beta^-|$.

5. Обсуждение. Изучены рост и ветвление острых трещин как в идеальных монокристаллах, так и в кристаллах с возмущениями. Построены для упомянутых кристаллов силовой и деформационный критерии. При последовательном догрузении тела с трещиной реализуется такое НДС, при котором выполняется либо силовой, либо деформационный критерии (возможно и одновременное выполнение этих критериев). В окрестности вершины трещины атомная решетка материала теряет устойчивость. Имеет место конкуренция хрупкого и квазихрупкого поведения материалов с квазивязким и вязким поведением, что, вообще говоря, определяется отношением σ_m/τ_m [1]. Последнее отношение в реальных конструкционных материалах можно изменять, используя приемы металлофизики. Принцип локальной симметрии [14] выполняется для симметричных систем и нарушается для систем с отсутствием симметрии. Компактность предлагаемого изложения проблемы ветвления (см. [17, 20, 21]) связана с переосмысливанием и формализацией результатов из соседней области знаний – физики твердого тела (металлофизики). В предлагаемом изложении используются: 1) не только понятия о теоретической прочности на растяжение и сдвиг [4], но и вся кривая теоретической прочности монокристалла типа Кулона–Мора для обобщенного напряженного состояния (см. [8–10]); при наличии дефектов монокристалла в окрестности вершины трещины эта кривая может иметь разрывы первого рода; 2) другое определение ядра дислокации (см. [11]), когда критическое смещение атомов в модели Френкеля – Конторовой соответствует теоретической прочности на сдвиг кристаллической решетки.

Атомная решетка может иметь кратные собственные состояния. При кратных собственных состояниях критические нагрузки разных состояний совпадают, имеет место множественное растрескивание материала. Для некоторых кристаллических решеток существует сгущение критических нагрузок собственных состояний в окрестности наименьшей критической нагрузки. Когда действуют возмущения, при кратных критических нагрузках и при их сгущении [22–25] наблюдаются большие разбросы при натуральных экспериментах и возникают определенные трудности при описании закритического поведения систем в численном эксперименте [25, 26].

Атомистика разрушения обсуждалась в обзорах [25, 26]. Подчеркнем, что первый из обзоров [25] посвящен численному эксперименту в микромеханике при наличии дефектов. Иногда при численных расчетах [25] нарушается принцип локальной симметрии [14] в симметричных системах из-за округлений при вычислениях. Было продемонстрировано [27] разумное применение метода конечных элементов к закритическому деформированию атомных решеток при наличии возмущений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (01-01-00873) и гранта Президента РФ № НШ-319.2003.1.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kelly A., Tyson W. R., Cottrell A.H. Ductile and brittle crystals // *Phil. Mag.* 1967. V. 15. № 135. P. 567–586.
2. Томсон Р. Физика разрушения // Атомистика разрушения. М.: Мир, 1987. С. 104–144 = Thomson R. *Physics of Fracture // Atomistics of Fracture*. N. Y.: Plenum Press, 1983. P. 167–204.

3. *Нотт Дж.* Механика разрушения // Атомистика разрушения. М.: Мир, 1987. С. 145–176 = *Knott J.F.* Mechanics of fracture. In: R. Latanision and J.R. Pickens (eds.), Atomistics of Fracture. Plenum Press. New York. 1983. P. 209–235.
4. *Макмилан Н.* Идеальная прочность твердых тел // Там же. С. 35–103 = *Macmillan N.H.* The ideal strength of solids. In: R. Latanision and J.R. Pickens (eds.), Atomistics of Fracture. N.Y.: Plenum Press, 1983. P. 95–164.
5. *Rice J., Thomson R.* Ductile versus brittle behaviour of crystals // *The Philos. Mag.* 1974. V. 29. P. 73–97.
6. *Саврук М.П.* Коэффициенты интенсивности напряжений в телах с трещинами. Механика разрушения и прочность материалов: В 4 т. Т. 2. Киев: Наук. думка, 1988.
7. *Маклинток Ф.А., Ирвин Дж.Р.* Вопросы пластичности в механике разрушения // Прикладные вопросы вязкости разрушения. М.: Мир, 1968. С. 143–186.
8. *Kornev V.M., Kurguzov V.D.* A discrete-integral strength criterion for complicated stress states // *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures.* 1999. V. 22, № 11. P. 989–995.
9. *Корнев В.М., Кургузов В.Д.* Дискретно-интегральный критерий прочности для сложного напряженного состояния // *Изв. РАН, МТТ.* 2000. № 6. С. 99–106.
10. *Корнев В.М., Кургузов В.Д.* Дискретно-интегральный критерий прочности для сложного напряженного состояния при наличии примесных атомов // *Динамика сплошной среды: Сб. науч. тр. / РАН. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики.* 2001. Вып. 119. С. 62–67.
11. *Корнев В.М., Кургузов В.Д.* Моделирование краевой дислокации и оценка ядра дислокации для плотноупакованного слоя атомов // *ПМТФ.* 2000. Т.41, № 5. С. 211–216.
12. *Поль Б.* Макроскопические критерии пластического течения и хрупкого разрушения // *Разрушение.* Ред. Г. Либовиц, Т. 2. Математические основы теории разрушения. М.: Мир, 1975. С. 336–520 = *Paul B.* Macroscopic criteria for plastic flow and brittle fracture // *Fracture. An Advanced Treatise.* Ed. H. Liebowitz, Vol. II. Mathematical Fundamentals. N. Y., London: Academic Press, 1968. P. 313–496.
13. *Аргатов И.И., Назаров С.А.* Высвобождение энергии при изломе трещины в плоском анизотропном теле // *ПММ.* 2002. Т. 66. Вып. 3. С. 502–514.
14. *Goldstein R.V., Salganik R.L.* Brittle fracture of solids with arbitrary crack // *Int. J. Fract.* 1974. V. 10. P. 507–523.
15. *Rauch G., Munz D., Fett T.* Calculation of crack tip phase transformation zones in TZP with the weight function method // *Fracture Mechanics of Ceramics.* Ed. R. C. Bradt and all, V. 13. Crack–Microstructure Interaction, R–Curve Behavior, Environmental Effects in Fracture, and Standardization. N. Y., Boston, Dordrecht, London, Moscow: Kluwer Academic / Plenum Publishers. 2002. P. 1–8.
16. *Schmitt-Thomas K.G.* Metallkunde für das Maschinenwesen. Berlin, etc.: Springer, 1989 = *Шмитт-Томас К.Г.* Металловедение для машиностроения. М.: Металлургия, 1995. 512 с.
17. *Gumbsch P.* An atomistic study of brittle fracture: Toward explicit failure criteria from atomistic modeling // *J. Mater. Res.* Nov 1995. V. 1. № 11. P. 2897–2907.
18. *Корнев В.М.* Интегральные критерии хрупкой прочности трещиноватых тел с дефектами при наличии вакансий в носике трещины. Прочность компактированных тел типа керамики // *ПМТФ.* 1996. Т. 37, № 5. С. 168–177.
19. *Корнев В.М., Тихомиров Ю.В.* Потеря устойчивости участка цепочки атомов при наличии примеси. Снижение прочности хрупких трещиноватых тел. // *ПМТФ.* 1996. Т. 37, № 3. С. 160–173.
20. *Rice J.R.* Dislocation nucleation from a crack tip: an analysis based on the Peierls concept // *J. Mech. Phys. Solids.* 1992. V. 40. No. 2. P. 239–271.
21. *Valentini M., Serkov S.K., Bigoni D., Movchan A.B.* Crack propagation in a brittle elastic material with defects // *Transactions of the ASME, J. of Appl. Mech.* 1999. V. 66. March. P. 79–86.
22. *Корнев В.М.* Об аппроксимации в задачах устойчивости и колебаний упругих оболочек при сгущении собственных значений // *Изв. АН СССР, МТТ.* 1972. № 2. С. 119–129.

23. *Корнев В.М., Коробейников С.Н.* О реализуемости симметрии решения в задаче осесимметричного деформирования цилиндрической оболочки при продольном сжатии // Аналитические и численные методы решения краевых задач пластичности и вязкоупругости. Свердловск: УНЦ АН СССР. 1986. С 70–77.
24. *Коробейников С.Н.* Численное решение нелинейных задач о деформировании упругих оболочек вращения в собственных состояниях // Сибирский журнал вычислительной математики. 2000. Т. 3. № 1. С. 43–56.
25. *Ortiz M., Phillips R.* Nanomechanics of defects in solids // Advances in Applied Mechanics. Vol. 36, Ed. by E. van der Giessen, T.Y.Wu. N.Y.: Academic Press, 1999. P. 1–79.
26. *Gumbsch P., Cannon R. M.* Atomistic aspects of brittle fracture // Materials Research Society. Bulletin. May 2000. P. 15–20.
27. *Коробейников С.Н.* Применение метода конечных элементов к решению нелинейных задач по деформированию и потере устойчивости атомных решеток. Препринт № 1–97. Новосибирск: Ин-т гидродинамики им. М. А. Лаврентьева, 1997. 33 с.

Новосибирск
e-mail: kornev@telefun.ru; kornev@hydro.nsc.ru

Поступила в редакцию
30.X.2002