УДК 539.3

ОБ ОДНОМ КРИТЕРИИ ПОТЕРИ УСТОЙЧИВОСТИ В АТОМАРНЫХ МОДЕЛЯХ

В.В. Стружанов (Екатеринбург)

Abstract

The concept of stability (instability) of physical state is introduced for the elastoplastic lattices. The criterion is developed for detection of such states and determination of the moment when the instability of equilibrium states of the whole system occurs. The criterion has been applied studying the stability of special model deforming.

Реальным материалам присуща, как правило, совокупность характерных линейных масштабов, связанных с различными уровнями их структуры, от атомных до макроскопических. Поэтому вопрос о необходимости учета структуры материалов при описании процессов деформирования и разрушения относится к числу основных в механике деформируемого твердого тела. В зависимости от того, имеются или нет среди определяющих величин параметры размерности длины, входящие в определяющие уравнения либо в дополнительные соотношения, различают два подхода, а именно - структурный и бесструктурный. Бесструктурные подходы - континуальные и применяются обычно при описании процессов деформирования, структурные - могут быть как континуальными, так и дискретными или представлять их комбинацию, и применяются, как правило, при анализе разрушения.

В рамках структурного подхода эффективным методическим приемом для анализа качественных закономерностей процесса разрушения служит исследование различных решеточных атомарных моделей материала [1 - 7]. В ряде работ данного направления [2,3,7] отмечается, что скачкообразное (катастрофическое) возникновение разрывов в решетке связано с потерей устойчивости положения равновесия отдельных атомов или атомных рядов, происходящее в процессе нагружения. При этом изучение данных явлений, как правило, опирается на общую теорию устойчивости дискретных консервативных систем, которая, к сожалению, не может быть распространена на континуальные модели.

В данной работе сделана попытка построения критерия потери устойчивости деформирования, обладающего необходимыми для переноса на упругопластические дискретные системы и непрерывные среды свойствами. С этой целью были рассмотрены простые атомарные модели, отражающие как упругие, так и пластические свойства материала.

1.Пусть взаимодействие в элементарной атомной ячейке, состоящей из двух атомов, определяется каким-либо известным потенциалом, задающим нелинейный характер атомных сил. То есть при растяжении зависимость силы q от смещения x имеет как восходящую, так и плавно спадающую до нуля ветви.

Максимальное значение функция $q = q(x)$ принимает при $x = x_c$. Тогда $\lambda^p = {}^{dq}\!/_{dx} > 0$ при $x < x_c$, $\lambda^p < 0$, $x > x_c$. Кроме того $\lambda^p(x_c) = 0$, $\lambda^p(0) = \lambda$,

$\lambda^p < \lambda$. Здесь величины λ^p имеют смысл касательных модулей, λ - модуля продольной упругости.

В целях моделирования пластических (неупругих) свойств материала полагаем, что при снятии нагрузки сила взаимодействия изменяется по линейному закону $\lambda(x - x^p)$ при фиксированном значении x^p, которое представляет собой неупругую составляющую смещения x. Считая далее, что деформация системы равняется x, получаем выражение для потенциальной энергии упругих деформаций $\Pi^e = 0{,}5\,\lambda(x - x^p)^2$.

Определим теперь закон приращения неупругих составляющих смещений. Имеем в общем случае $q = \lambda(x - x^p)$. Отсюда $d\,q = \lambda(d\,x - d\,x^p)$. С другой стороны $d\,q = \lambda^p d\,x$. Приравнивая оба выражения, находим

$$d\,x^p = \left(1 - \frac{\lambda^p}{\lambda}\right) d\,x = \frac{\lambda - \lambda^p}{\lambda\lambda^p}\, d\,q. \qquad (1)$$

И наконец отметим, что мощность диссипации

$$d\,D = q\,dx^p = q(\lambda - \lambda^p)d\,q/\lambda\lambda^p,$$

при растяжении двух атомов - величина положительная.

2. Опираясь на теорему Лагранжа дадим следующее определение. Физическое состояние системы (ФСС) в некоторой конфигурации, характеризуемой совокупностью параметров состояния и управления (нагрузок), устойчивое, если при произвольном малом изменении этих параметров на любом активном пути нагружения потенциальная энергия упругих деформаций увеличивается. Если существуют пути нагружения, на которых потенциальная энергия упругих деформаций уменьшается, то исходное физическое состояние системы является неустойчивым.

При разгрузке, очевидно, состояние системы всегда устойчивое.

Здесь под активным нагружением будем понимать такой процесс деформирования, при котором происходит изменение неупругих составляющих смещений (деформаций).

Очевидно, что в устойчивом физическом состоянии система имеет локальный минимум потенциальной энергии упругих деформаций. В противном случае она обладает локальным максимумом потенциальной энергии или имеет место точка перегиба.

3. Для произвольного положения системы двух атомов приращение потенциальной энергии упругих деформаций $d\Pi^e = \lambda(x - x^p)(dx - dx^p)$. Отсюда $d\Pi^e > 0$, когда $dx > dx^p$, и $d\Pi^e < 0$, когда $dx < dx^p$. Вспоминая формулу (1) и определение устойчивого физического состояния, получаем, что при $\lambda^p(x) > 0$ состояние системы устойчивое, а при $\lambda^p(x) < 0$ - неустойчивое.

Введем теперь следующий функционал

$$R = \lambda\,dxdx - \lambda\,dx^p dx^p, \qquad (2)$$

где dx^p и dx связаны выражением (1). Будем называть его R - суммой данной системы. Очевидно, что $R > 0$ отвечает устойчивым ФСС, $R < 0$ - неустойчивым.

Далее из постулата устойчивости Друккера о положительности работы внешних сил в случае возникновения необратимой деформации на замкнутом цикле их приложения и снятия следует, что при устойчивом физическом состоянии системы атомов выполняются неравенства $dqdx > 0$, $dqdx^p > 0$. Когда система находится в неустойчивом физическом состоянии, то $dqdx < 0$, $dqdx^p < 0$.

Преобразуем выражение $dqdx$ с использованием равенства $dx = dx^e + dx^p$, $dq = \lambda\, dx^e$. Имеем

$$dqdx = \lambda(dx - dx^p)(dx^e + dx^p) = \lambda\, dxdx - dqdx^p - \lambda\, dx^p dx^p.$$

Отсюда, если постулат Друккера выполняется, то $R > 0$. В противном случае $R < 0$.

С другой стороны, подставляя выражение (1) в формулу (2) и используя соотношение $dq = \lambda^p dx$, получаем

$$R = \lambda^{-1}\lambda^p(2\lambda - \lambda^p)dxdx = \lambda^{-1}(2\lambda - \lambda^p)dqdx.$$

Следовательно, $dqdx > 0$, когда $R > 0$, и $dqdx < 0$ при $R < 0$. Кроме того

$$dqdx = \lambda\, dx^e dx^e + dqdx^p.$$

Так как $\lambda\, dx^e dx^e > 0$, то из условия $R < 0$ следует $dqdx^p < 0$ и наоборот.

Таким образом, критерий Друккера эквивалентен введенному R-критерию. Смысл полученного условия устойчивости состоит в том, что физическое состояние атомной ячейки устойчиво до тех пор, пока величина приращения полного удлинения превышает соответствующее ей приращение неупругого смещения. В этом случае при возмущении системы потенциальная энергия упругих деформаций растет. Если ФСС неустойчиво, то приращение необратимого удлинения превышает приращение полного смещения. Очевидно, такой процесс происходит за счет уменьшения величины обратимых смещений. Деформирование в данном случае после возмущения системы происходит с потерей потенциальной энергии упругих деформаций.

4.Рассмотрим теперь решетку, состоящую из трех параллельных рядов атомов. Один из крайних рядов закреплен, к атомам второго приложены параллельные растягивающие усилия, равнодействующая которых равна p. Ряды могут перемещаться только параллельно друг другу. То есть атомы крайнего ряда имеют одно и то же перемещение u, а атомы среднего ряда - перемещение x.

Взаимодействие атомов среднего ряда с соответствующими им закрепленными атомами определяется функциями $q_i(x)$ $(i = 1, \ldots, n,\ n$ - число атомов в рядах). Таким образом, имеем известный разброс свойств. Характеристики этих связей описаны выше, а именно: их касательные модули равны λ_i^p, модули продольной упругости - λ_i, формула (1) связывает приращение смещений с их неупругими составляющими.

Взаимодействие же атомов подвижного крайнего ряда с атомами среднего ряда полагаем линейным с коэффициентом пропорциональности c.

Сначала исследуем устойчивость процесса растяжения, используя аппарат, изложенный в [3]. Запишем выражение полной энергии системы:

$$\Pi = \int_0^x q_\alpha dx + \frac{nc}{2}(u-x)^2 - \int_0^u p\,du\,, \tag{3}$$

где $q_\alpha = \sum_{i=1}^{n} q_i$. Критические точки функции Π определяются уравнениями

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x} = q_\alpha - nc(u-x) = 0\,, \tag{4}$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial u} = nc(u-x) - p = 0\,. \tag{5}$$

Очевидно, что при заданных значениях p все положения равновесия получаются из решения уравнений (4), (5).

Для определения вырожденных критических точек, где происходит смена устойчивых положений равновесия на неустойчивые, к уравнениям (4), (5) необходимо добавить уравнение, получающееся приравниванием нулю детерминанта матрицы Гессе. Имеем

$$\det\left|\partial^2\Pi / \partial x_i\, \partial x_j\right| = nc\left(\frac{d\,q_\alpha}{dx} + nc\right) - n^2c^2 = \lambda_\alpha^p = 0 \ (i, j = 1,2).$$

Здесь $\lambda_\alpha^p = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^p$, $x_1 = x, x_2 = u$. Отсюда при $\lambda_\alpha^p > 0$ процесс квазистатического деформирования устойчив, при $\lambda_\alpha^p < 0$ положения равновесия системы неустойчивы. Потеря устойчивости реализуется для тех значений (x, u, p) - решений уравнений (4), (5), для которых $\lambda_\alpha^p = 0$. В этом случае образуется разрыв между закрепленным и средним рядами атомов.

Если реализуется кинематическое нагружение, при котором задается перемещение u, а состояние системы определяет один параметр x, то в выражении (3) исчезает последний член и, следовательно, остается только одно уравнение равновесия (4). Проделывая аналогичные операции, находим, что при $\lambda_\alpha^p > -nc$ процесс растяжения устойчив, при $\lambda_\alpha^p < -nc$ - неустойчив. Потеря устойчивости происходит, когда $\lambda_\alpha^p = -nc$.

5. Запишем R-сумму данной системы, суммируя выражения (2) для каждой связи. Сначала рассмотрим случай, когда $du > 0, dx > 0$, $du > dx$, то есть все связи работают в условиях активного нагружения. Имеем

$$R = \lambda_\alpha dx dx - \lambda_\alpha dx^p dx^p + nc(du - dx)(du - dx)\,. \tag{6}$$

Здесь $\lambda_\alpha = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$, du, dx - малое возмущение параметров состояния системы, находящейся в некотором положении равновесия, определяемом параметрами (x, u, p). В силу уравнений равновесия (4),(5) с учетом равенства $dq_\alpha = \lambda_\alpha^p dx$ получаем

$$dx = \frac{nc\,du}{\lambda_\alpha^p + nc}, \qquad du = \frac{dp}{nc}\frac{\lambda_\alpha^p + nc}{\lambda_\alpha^p}. \tag{7}$$

Очевидно, что данный случай реализуется при $dp > 0$, $\lambda_\alpha^p > 0$. Подставляя выражения (7) в формулу (6) и используя соотношение (1), находим квадратичную форму

$$R = R_p = B\,dpdp / \left(\lambda_\alpha^p\right)^2,$$

где $B = \lambda_\alpha - \lambda_\alpha^{-1}(\lambda_\alpha - \lambda_\alpha^p)^2 + (nc)^{-1}(\lambda_\alpha^p)^2$.

Отсюда $R_p > 0$ при $\lambda_\alpha^p > 0$ и физическое состояние атомной решетки устойчиво. Кроме того, устойчиво и исходное (невозмущенное) положение равновесия. Потеря устойчивости происходит, когда $\lambda_\alpha^p = 0$ и $R_p = \infty$.

Пусть теперь $du < 0$, $dx > 0$, или $du > 0$, $dx > 0$, $dx > du$, то есть упругая связь разгружается. В первом случае $dp < 0$, $\lambda_\alpha^p < -nc$, во втором $dp < 0$, $0 > \lambda_\alpha^p > -nc$. Так как упругая связь теряет энергию, то R-сумма в данном случае принимает вид

$$R_1 = \lambda_\alpha dxdx - \lambda_\alpha dx^p dx^p - nc(du - dx)(du - dx).$$

Соответственно

$$R_{1p} = B_1 dpdp / \left(\lambda_\alpha^p\right)^2,$$

где $B_1 = \lambda_\alpha - \lambda_\alpha^{-1}(\lambda_\alpha - \lambda_\alpha^p)^2 - (nc)^{-1}(\lambda_\alpha^p)^2$. Отсюда $R_{1p} < 0$ и физическое состояние системы неустойчиво. Очевидно, что и исходное положение равновесия системы неустойчивое.

Для кинематического нагружения в первом варианте получаем

$$R = R_u = B(nc)^2 du\,du / \left(\lambda_\alpha^p + nc\right)^2.$$

Когда $\lambda_\alpha^p > 0$, то $R_u > 0$ и физическое состояние системы устойчиво. Устойчиво также исходное положение равновесия. Кроме того, при $\lambda_\alpha^p = 0$ потери устойчивости не происходит.

Если $0 > \lambda_\alpha^p > -nc$ $(dx > du > 0)$, то $R_{1u} = B_1(nc)^2 du\,du / \left(\lambda_\alpha^p + nc\right)^2 < 0$. Физическое состояние системы атомов неустойчиво, деформирование может идти только с потерей энергии упругих деформаций. Однако исходное (невозмущенное) положение равновесия системы сохраняет устойчивость. Потеря устойчивости равновесия происходит при $\lambda_\alpha^p = -nc$ и $R_{1u} = -\infty$.

Когда $\lambda_\alpha^p < -nc$ $(du < 0, dx > 0)$, то $R_{1u} < 0$ и физическое состояние системы неустойчиво. Кроме того, неустойчиво и исходное (невозмущенное) положение равновесия.

Очевидно, что приведенный анализ с помощью R-сумм полностью совпадает с анализом устойчивости процесса растяжения атомной решетки, изложенным в пункте 4.

6. Заключение

Введено понятие устойчивости (неустойчивости) физического состояния атомарной решетки. Разработан критерий для определения таких состояний и момента потери устойчивости положений равновесия системы. Показано, что для сохранения положениями равновесия системы устойчивости при любых внешних нагрузках достаточно, чтобы физическое состояние ее было устойчиво. Если же физическое состояние неустойчиво, то для сохранения устойчивости положений равновесия в ходе деформирования необходимо, чтобы нагружение осуществлялось специальным образом, например, посредством задания смещений точкам границы.

Библиографический список

1. Новожилов В.В. О необходимом и достаточном условии хрупкой прочности // ПММ. - 1969. - Т.33, Вып.2. - С.212-222.
2. Новожилов В.В. К основам теории равновесных трещин в упругих телах // ПММ. - 1969. - Т.33, Вып. 5. - С.797-812.
3. 3.Стружанов В.В. Об одном подходе к изучению механизма зарождения трещин // ПМТФ. - 1986. - № 6. - С.118-123.
4. Томпсон Д.М.Т. Неустойчивость и катастрофы в науке и технике.- М.: Мир, 1985.- 254с.
5. Дайнис Г., Пэскин А. Моделирование трещин с помощью вычислительных машин// Атомистика разрушения. - М.: Мир, 1987. -С.177-212.
6. Корнев В.М., Тихомиров Ю.В. О критерии хрупкого разрушения тел с трещиной при наличии дефекта атомной решетки // Изв. РАН МТТ. - 1994. -№ 2.- С.185 - 193.
7. Корнев В.М., Тихомиров Ю.В. Потеря устойчивости цепочки атомов при наличии примеси. Снижение прочности хрупких трещиноватых тел // ПМТФ. - 1996. - Т.37, № 3. - С.160-173.