

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Кафедра теоретической механики

Работа допущена к защите

Зав. кафедрой, д.ф.-м.н., проф.

_____ **А. М. Кривцов**

" — " _____

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание академической степени
МАГИСТРА

Тема:

Моделирование распространения трещин в нанокристаллах Fe при различных условиях нагружения с использованием метода молекулярной динамики

Направление: 010800 – Механика и математическое моделирование

Выполнил студент гр.63604/1 К.С.Буковская

Руководитель А.Ю.Панченко

Консультант по вопросам охраны труда В.В.Монашков

Санкт-Петербург
2015

Оглавление

Введение.....	3
I. Моделирование образца со сквозной и внутренней нанотрециной.	7
1 Метод реализации вычислений.....	7
1.1 LAMMPS.....	7
1.2 EAM (потенциал погруженного атома)	10
2 Моделирование сквозной нанотрецины в материале (α -железо).	11
3 Моделирование внутренней нанотрецины в материале (α -железо).	15
4 Сравнение с теорией.	16
II. Моделирование образцов с тремя видами краевых трещин.	21
III. Моделирование образца со сквозной трещиной и включение графена.	37
1. Графен и его свойства.....	37
2. Модель α -железа с включением графена.	37
IV. Заключение	42
V. Список литературы	43
VI. Приложение 1.....	45

Введение

При проектирование и эксплуатация новой техники необходим всесторонний анализ прочности и надежности ее элементов на основе точных расчетов напряженно-деформированного состояния. С одной стороны, прочность - это свойство конструкции выдерживать (нести) эксплуатационные нагрузки и воздействия среды без разрушения. Однако чтобы обеспечить прочность материала необходимо знать причины и характер его возможного разрушения. Поэтому проблема разрушения является основной проблемой учения о сопротивлении материалов внешним воздействиям. Направление науки о прочности, которое связано с исследованием несущей способности конструкций с учетом начального распределения повреждений и с изучением закономерностей зарождения и развития трещин, получило название механика разрушения. Появление трещин в конструкции и ее разрушение, которое происходило при средних расчетных напряжениях ниже предела текучести, показали необходимость дополнить классические методы расчета на прочность дополнительными условиями, которые учитывают развитие трещин и новыми характеристиками материала, описывающими стадию разрушения.

Впервые задача о критическом состоянии тела с трещиной была решена Гриффитсом [1] с позиций общего энергетического баланса исследуемого объекта. Затем Вестергаард [2] и Снеддон [3] аналитически описали распределение напряжений у вершины трещины в упругом теле. Основываясь на этих результатах, Дж. Ирвин [4] предложил в качестве критических величин использовать коэффициенты интенсивности напряжений (КИН). Силовой критерий локального разрушения Ирвина состоит в сравнении рассчитанных значений КИН с их критическими значениями, которые определяются из эксперимента. Также Ирвин показал эквивалентность силового критерия разрушения и энергетического подхода Гриффита в условиях упругой работы материала.

Крупным достижением механики разрушения явилась концепция квазихрупкого разрушения, впервые сформулированная Ирвином [5] и Орованом [6]. Начиная с работ Гриффита, Орована и Ирвина развитие теории прочности твердых тел пошло по пути изучения процесса разрушения - распространения трещин в твердых телах. Работы Гриффита, Орована, Ирвина и других исследователей стали основой теории линейной

механики разрушения. Таким образом, линейная механика разрушения изучает состояние тел с трещинами в предположении, что материал сохраняет свойство линейной упругости вплоть до разрушения во всем объеме тела, за исключением может быть, небольшой окрестности в вершине трещины.

Необходимо подчеркнуть, несмотря на большое количество исследований, теорию линейной механики разрушения надежно можно использовать для практических инженерных расчетов только при решении плоских задач (плоское напряженное состояние, плоская деформация). Поэтому исследование трехмерных задач механики разрушения является актуальным и необходимым направлением развития теории разрушения в том числе и на наноразмерном уровне. Развитие нанонауки и нанотехнологии приблизилось к стадии, связанной с необходимостью их широкого применения, что в первую очередь относится к электронике, в которой наметился переход от микро- к наноэлектронике. Рассмотрим такой переход в качестве примера эволюционного развития и внедрения нанотехнологий. Несмотря на все достижения нанотехнологии, любые работы на молекулярном уровне остаются чрезвычайно сложной задачей. Впрочем, современные ученые работают над созданием наносистем, которые являлись бы аналогами хорошо всем известных электромоторов. Эти объекты получили название «наноэлектромеханические системы» или НЭМС, поскольку они развиваются «наносилы» под действием электрического поля или света, или, наоборот, при приложении внешней силы создают электромагнитный отклик. В настоящее время одной из общих тенденций развития современной техники является миниатюризация функциональных устройств. В наиболее явном виде эта тенденция проявилась в процессе эволюции электронных компонентов. НЭМС используются в качестве высокочастотных осцилляторов (до 10 ГГц), наномоторов и модуляторов. В качестве материалов для изготовления НЭМС широко используются графен и углеродные нанотрубки.

В данной работе рассматривается новый, но чрезвычайно перспективном виде наноматериалов, который называется нанокомпозитами. Нанокомпозиты обладают превосходными физическими и химическими свойствами благодаря своей структуре и могут применяться в самых разных областях, включая производство электроники и новых материалов, в медицине и в экологии, в аэрокосмической и автомобильной отраслях. Особенностью деформирования пространственных конструкций из

композитных материалов является возможность возникновения не только трещин, обусловленных разрывом волокон и материала матрицы, но также и образование в процессе деформирования зон расслоения. Вследствие этих процессов, даже начально однородная композитная конструкция превращается в многослойную систему. Поскольку толщины отслоившихся участков, зачастую, малы по сравнению с размерами их в плане, использование стандартных 3D конечных элементов в этих случаях, как правило, приводит к возникновению численной неустойчивости решений. Использование оболочечных и трехмерных многослойных КЭ не позволяет моделировать неоднородность распределения деформаций поперечного сдвига и растяжения по толщине зон расслоений в связи с наложенными ограничениями на функции аппроксимации.

Для конструкций, выполненных из композиционных материалов, наличие более или менее значительных зон разрушения если и не является нормальным явлением, то, по крайней мере, далеко не всегда приводит к фатальным последствиям. Однако, при проектировании ответственных объектов, наличие подобных зон должно быть учтено, а также проанализирована возможность их дальнейшего развития и влияния на несущую способность конструкции в целом.

В связи со сложностью физических процессов, протекающих на микроуровне при разрушении композитных материалов (разрушение матрицы, волокон, пограничного слоя, влияние конструктивных дефектов, дислокационные явления и т.п.), описание работы конструкций выполненных на их основе, с требуемой для инженерной практики степенью достоверности возможно при помощи феноменологических критериев прочности. Главным преимуществом феноменологического подхода является интегральный учет всех факторов, влияющих на процесс разрушения композитов, а основным положением - зависимость прочности материала лишь от уровня достигнутого напряженно - деформированного состояния, через параметры которого записываются функции прочности. Нарушение феноменологических критериев прочности приводит к переходу материала в предельное состояние. Для однозначного определения этих функций требуются данные о прочностных характеристиках композита, которые могут быть получены экспериментально (пределы прочности материала в условиях простых напряженных состояний в случаях статического, либо динамического нагружении)

Учитывая все вышесказанное актуальной задачей является разработка метода, для проведения предсказательного моделирования процессов распространения трещин на наноразмерном уровне.

Вследствие чего были поставлены цели:

- Сравнить напряжения возникающие вблизи трещины с точки зрения молекулярно динамической модели и континуального подхода.
- Исследовать развитие трещин в наноразмерном образце.
- Сравнить скорости раскрытия трещин при различных температурах.
- Исследовать влияние графенового включения на прочностные свойства в наноразмерном образце.
- Сравнить напряжения в моделях без включения графена и с графеновым включением.

Вследствие чего работу можно разделить на три основные части:

- В первой части работы проведено моделирование сквозной и внутренней нанотрещины, проведено сравнение с аналитической моделью.
- Во второй части моделируются 3 вида краевой трещины и сравнивается с аналитической моделью. Так же для получения точного решения строится модель МКЭ.
- В третьей части проведено моделирование сквозной трещины с включением графена, произведено сравнение распределений напряжений в модели без включения и с включением.

I. Моделирование образца со сквозной и внутренней нанотрещиной.

1 Метод реализации вычислений

В работе рассматриваются образцы α -железа, такой вид железа обладает магнитными свойствами, устойчив при температуре ниже 910 С, имеет кристаллическую решетку в форме центрированного куба. Твердый раствор углерода в α - Fe называется ферритом. Такой вид железа отличается от других состояний (гамма- и дельта- железо) которые обладают гранецентрированной структурой, а от бета-железа наличием ферромагнетизма. Так же не растворяет углерод. Моделирование происходило в сотрудничестве с Университетом города Штутгарт (IMWF) Институт испытания материалов, материаловедения и сопротивления материалов. Данный институт специализируется и является одним из лучших в Германии в изучении упрочнения материалов и материаловедение в целом. Совместно с профессором З. Шмаудером, мы рассмотрели задачу моделирования пластинки графена в модели α -железа и провели сравнительный анализ полученных результатов. Для моделирование процесса распространения трещин был использован пакет для классической молекулярной динамики LAMMPS.

Были рассмотрены следующие случаи:

- 1) Сквозная нанотрещина в материале (α -железо).
- 2) Внутренняя нанотрещина в материале(α -железо).

Разрушение в методах частиц описывается естественным образом, поэтому изначально методы частиц использовались для описания процессов в сыпучих и слабосвязанных твёрдофазных средах.

1.1 LAMMPS

LAMMPS является классическим кодом молекулярной динамики, который моделирует ансамбли частиц в жидкости, твердом и газообразном виде. Может моделировать атомные, полимерные, биологические, металлические и гранулированные системы с разнообразными силовыми полями и граничными

условиями. LAMMPS - крупномасштабный атомно/молекулярный массивно-параллельный симулятор.

В программе используется, как параллельная версия LAMMPS (с участием MPI-Message Passing Interface), так и версия для запуска в однопроцессорном режиме.

MPI является наиболее распространённым стандартом интерфейса обмена данными в параллельном программировании, существуют его реализации для большого числа компьютерных платформ. Используется при разработке программ для кластеров и суперкомпьютеров. Основным средством коммуникации между процессами в MPI является передача сообщений друг другу.

В пакете реализована поддержка большинства двухчастичных и многочастичных короткодействующих потенциалов (потенциалы Леннард-Джонса, Морзе, Юкавы, EAM, AI-REBO) [7],[8],[25],[26]. В данном пакете осуществляется повышение производительности процесса за счет распараллеливания процессорных вычислений и операций ввода-вывода, что является достоинством системы. Параллельные вычисления — способ организации компьютерных вычислений, при которых программы разрабатываются как набор взаимодействующих вычислительных процессов, работающих параллельно (одновременно). Термин охватывает совокупность вопросов параллелизма в программировании, а также создание эффективно действующих аппаратных реализаций. Теория параллельных вычислений составляет раздел прикладной теории алгоритмов, в которой осуществляется повышение производительности процесса за счет распараллеливания процессорных вычислений и операций ввода-вывода, что является определенно достоинством системы. Параллельные вычисления — способ организации компьютерных вычислений, при котором программы разрабатываются как набор взаимодействующих достоинством системы. Параллельные вычисления — способ организации компьютерных вычислений, при котором программы разрабатываются как набор взаимодействующих вычислительных процессов, работающих параллельно (одновременно). Термин охватывает совокупность вопросов параллелизма в программировании, а также создание эффективно действующих аппаратных реализаций. Теория параллельных вычислений составляет раздел прикладной теории алгоритмов. Существуют различные способы реализации параллельных вычислений. В программе LAMMPS осуществляется взаимодействие с

помощью передачи сообщений: на каждом процессоре многопроцессорной системы запускается одно-поточный процесс, который обменивается данными с другими процессами, работающими на других процессорах, с помощью сообщений. Распараллеливание является пространственным, то есть каждый поток отвечает за свою часть пространства, каждому потоку соответствует свое ядро, которое интегрирует движение подмножества частиц. В пакете реализована квазимного задачность на уровне одного исполняемого процесса, то есть все потоки выполняются в адресном пространстве процесса. Так же выполняющийся процесс имеет как минимум один (главный) поток. Так как в пакете используется много-поточность, то есть процесс состоит из нескольких потоков, которые запускаются параллельно, при этом без определенного порядка по времени. Данное свойство помогает обеспечить более эффективное использование ресурсов вычислительной машины. Использование OpenMPI процессов. MPI-схема представляет собой, распределенную работу, при которой определенный поток обрабатывает некоторый пространственный домен.

Процессы создаются явно, путем вызова соответствующей функции операционной системы, а обмен сообщениями – с помощью библиотеки (например реализации протокола MPI) и осуществляется с помощью команды MPI_Bcast, рассыпает сообщения от «корня» остальным процессам, а так же MPI_Sendrecv, при помощи которой посылаются и получаются сообщения.

Основная сложность при проектировании параллельных программ – обеспечить правильную последовательность взаимодействий между различными вычислительными процессами, а также координацию ресурсов, разделяемых между процессами.

Однако основной проблемой именно метода частиц является построение потенциала взаимодействия, обеспечивающего поведение ансамбля частиц, соответствующее отклику моделируемой среды. В настоящий время созданы базовые модели взаимодействия, позволяющие описывать сложные процессы в сыпучих, слабосвязанных и консолидированных твердофазных средах: течение гранулированных сред, компактирование порошковых систем, пластическое деформирование и разрушение твердофазных материалов и т.д. Кроме того, широкое распространение получают потенциал погруженного атома.

1.2 EAM (*Embedded-atom method*) метод погруженного атома (МПА)

МПА[11] является многочастичным потенциалом, на практике для уменьшения сложности и соответственно, времени расчетов, часто ограничивают количество соседей так называемым «радиусом обрезания».

Потенциал погруженного атома обладает рядом особенностей по сравнению с потенциалом Леннарда-Джонса. Полная потенциальная энергия системы складывается из «энергии погружения» (U^{em}) и дополнительного парного потенциала:

$$U = U^{em} + U^{pair} = \sum_i F_i(p_i^\Sigma) + \sum_i \sum_{i < j} \Phi_{ij}(r_{ij}), \quad p_i^\Sigma = \sum_{j \neq i} p_j(r_{ij})$$

Здесь p – эффективная электронная плотность, которая создается вокруг каждого ядра j . При расчете энергии погружения для каждого атома i определяется суммарная электронная плотность p^Σ , которая наводится всеми соседними атомами j в точке $r = r_i$, после чего вычисляется энергия $F(p^\Sigma)$. Таким образом, для вычисления потенциала требуется задание трех функций: электронной плотности, энергии погружения и парного потенциала. Вид этих функций находится, как правило, из ab initio и сравнивается с результатами эксперимента, а сами функции задаются в виде интерполяционных таблиц.

При расчете сил, действующих на частицы, необходимо знать значения производных указанных функций, которые целесообразно посчитать один раз, и сохранить также в виде интерполяционных таблиц. Сила, соответствующая парному взаимодействию имеет достаточно простой вид, а сила, связанная с энергией погружения, выражается по формуле:

$$\bar{f}_k^{em} = -\frac{\partial U^{em}}{\partial \bar{r}_k} = -\sum_{j \neq k} \frac{\bar{r}_{kj}}{r_{kj}} [F'_k(p_k^\Sigma)p'_j(r_{kj}) + F'_j(p_j^\Sigma)p'_k(r_{kj})]$$

Основной особенностью здесь является то, что расчет приходится проводить в два этапа. На первом этапе необходимо произвести суммирование электронных плотностей и сохранить полученный массив значений p^Σ (или $F'(p^\Sigma)$) для каждого

атома. На втором этапе производится суммирование по j , в результате чего определяется сила, действующая на частицу k .

Table 1. Physical properties calculated with the EAM potentials. The properties used in the fitting procedure are printed in bold.

Property	Target value	Value for the following potentials					
		Johnson (1964) potential	Ackland <i>et al.</i> (1997) potential	Potential 1	Potential 2	Potential 3	Potential 4
a (\AA), bcc at $T=0$ K	2.8553 ^a	2.8600	2.8665	2.8553	2.8553	2.8823	2.8557
a (\AA), bcc at $T=1820$ K	2.94	2.965	2.921	2.922	2.926	— ^b	2.930
E_{coh} (eV atom ⁻¹), bcc	-4.316 ^a	-1.537	-4.316	-4.126	-4.122	-5.170	-4.155
E_{f}^* (eV), bcc at $T=0$ K	1.84 ^a	1.54	1.89	1.84	1.84	2.72	1.87
E_{D} (eV atom ⁻¹), bcc at $T=0$ K	2.65 ^b	2.05	2.49	2.40	2.34	2.08	2.24
E_{f}^* (eV), $\langle 100 \rangle$ bcc at $T=0$ K	4.37 ^d	5.93	6.12	3.92	4.34	3.08	3.77
E_{f}^* (eV), $\langle 110 \rangle$ bcc at $T=0$ K	3.41 ^d	4.64	4.88	3.46	3.53	2.40	3.20
E_{f}^* (eV), $\langle 111 \rangle$ bcc at $T=0$ K	4.11 ^d	4.90	5.02	3.67	4.02	2.63	3.52
C_{11} (GPa), bcc at $T=0$ K	243.4 ^a	192.3	243.4	243.4	243.4	143.7	243.5
C_{12} (GPa), bcc at $T=0$ K	145.0 ^a	96.1	145.0	145.0	145.0	87.5	145.0
C_{44} (GPa), bcc at $T=0$ K	116.0 ^a	96.1	116.0	116.0	116.0	41.3	115.8
γ_{100} (eV \AA^{-2}), bcc at $T=0$ K	0.136 ^e	0.079	0.113	0.105	0.110	0.183	0.125
a (\AA), fcc at $T=0$ K	3.6583 ^e	3.7005	3.6800	3.6581	3.6584	3.6454	3.6522
$\Delta E_{\text{bcc} \rightarrow \text{fcc}}$ (eV atom ⁻¹)	0.122 ^e	0.027	0.054	0.120	0.120	0.049	0.127
ρ_{liquid} (GPa), $T=1820$ K	0.00 ^f	5.434	-0.460	-1.173	-0.034	0.031	0.006
PCF first peak position (\AA), $T=1820$ K	2.49 ^g	2.51	2.53	2.48	2.48	2.49	2.48
PCF first peak height, $T=1820$ K	2.28 ^g	2.80	2.87	2.43	2.46	2.30	2.36
D_{liquid} ($10^{-5} \text{ cm}^2 \text{s}^{-1}$), $T=1820$ K	1.61	1.19	3.34	3.62	4.66	4.37	3.60
ΔH_{melt} (eV atom ⁻¹), $T=1820$ K	0.143	0.115	0.188	0.186 ^h	0.162	—	0.153
R_{F1} (eV \AA^{-1})	0.00	0.61	0.63	0.24	0.27	1.57	1.49
R_{F2} (eV \AA^{-1})	0.00	0.69	0.66	0.25	0.28	1.15	1.08

Таблица 1. Значения физических параметров ОЦК железа, рассчитанные с помощью различных подходов к описанию межатомного взаимодействия. Наборы 1–5 получены с помощью МПА в работе [8].

Проведенный обзор работ, касающийся метода погруженного атома[8][9],[10],[11],[12] показывает, что метод постоянно развивается и модифицируется. В настоящее время для многих металлов и сплавов на их основе не существует альтернативных подходов к описанию межатомных взаимодействий, позволяющих достичь сравнимого уровня воспроизведения физических свойств. Разработанные к данному моменту наборы функций метода погруженного атома дают возможность проводить микроскопическое моделирование дефектов структуры для ряда практически важных металлических систем при наличии соответствующего программного обеспечения.

2 Моделирование сквозной нанотрещины в материале (α -железо).

Нами рассматривается ОЦК (объемноцентрированная кубическая решетка) с ориентацией **X** [1 1 1] **Y** [1 1 0] **Z** [1 1 2], в которой вырезалась сквозная трещина с ориентацией (001). При деформации решетка меняет свою структуру. За основу постановки модели была выбрана работа[18]. В статье были представлены результаты

молекулярно динамического (МД) моделирования трехмерного образца при квазиупругом нагружении сквозной микротрешины в альфа-железе. Бородин и Владимиров показали, что началу развития трещины в железе предшествует излучения петли дислокаций из вершин трещины, что согласуется с ранее проведенным квазидвумерным моделированием. Применение методики разложения Вороного, позволило им уточнить кинетику структурных преобразований на вершинах и развития трещины на трех наиболее используемых системах распространения трещины в железе. Показано, что дислокации, исходящие от кончиков трещин, не только сопровождают зарождение трещины, но остаются существенной особенностью распространения трещины на (0 0 1) плоскостях.

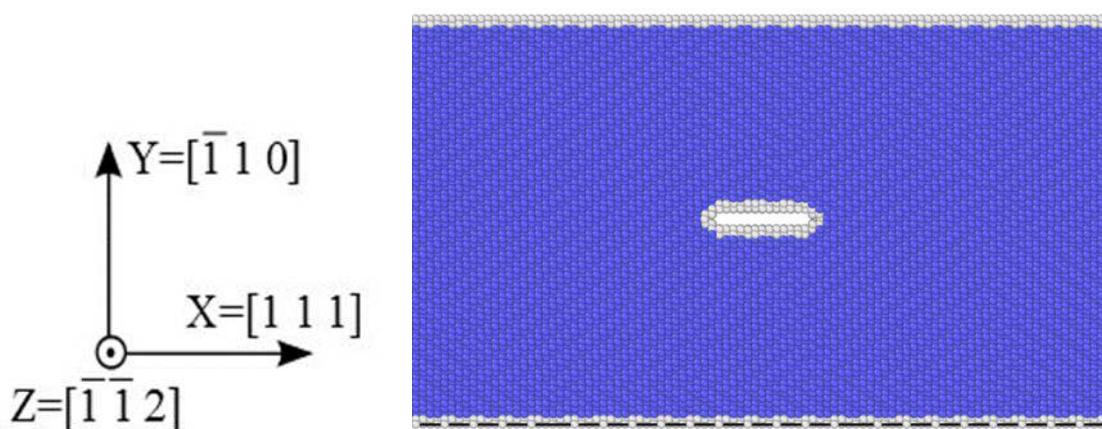


Рис.1.1. Сквозная нанотрешина в образце.

Описание модели:

Нами рассматривается ОЦК решетка ориентация $\mathbf{X} [1 1 1]$ $\mathbf{Y} [-1 1 0]$ $\mathbf{Z} [-1 -1 2]$ (рис.1.1), размеры которой в Ангстремах(10^{-10} м) составляют:

по оси \mathbf{X} длина модели составляет 241.959 Å

по оси \mathbf{Y} высота модели составляет 181.654 Å

по оси \mathbf{Z} ширина модели составляет 24.1961 Å

В направлении **Y** приложено напряжение 250 МПа, по оси **X** свободные границы, по **Z** периодические граничные условия. Цель постановки задачи в данном виде – улучшение описания поля для модели наноуровня у вершины трещины по сравнению с континуальными методами.

Реализация модели в LAMMPS:

Каждая симуляция имеет следующие 4 этапа:

1. задание начальных положений модели.
2. минимизация энергии (метод молекулярной статики).
3. приведение системы к динамическому равновесию.
4. рабочая часть симуляции.

С помощью пакета LAMMPS создается файл Gener Perfect, в котором мы создаем монокристалл железа. С нужными нам размерами и свойствами. Происходит релаксация размеров расчетной области. Перед тем как начать основную часть симуляции, система должна быть близка к динамическому равновесию, для того чтобы исключить возможные нежелательные осцилляции, которые могут влиять на результат расчетов, при этом после генерации структуры положения атомов могут быть велики от своего равновесного положения. Для приведения структуры к своему равновесному положению лучше использовать метод молекулярной статики, так как он гораздо менее требователен к вычислительным ресурсам .

Далее создается файл Gener Crack, в котором задается размер трещины и определенное количество частиц, которые будут вырезаны. Далее модель переходит в стадию минимизации энергии в статике, создается файл Min. Для этого используется метод градиентов в модификации Полака-Рибьера. Далее в файле Equil происходит приведение к динамическому равновесию. Силы воздействия задаются в финальном файле Tensile, в котором мы прописываем нагружение на верхнюю и нижнюю плоскости, приграничные атомы (на рис.1.1. они показаны серым цветом) в направлениях (-y) и y.

На рис.2 можно наблюдать как выглядит распределение напряжений при моделировании и построении данной модели. Напряжения колеблются от -1.50 до 1.70

МПа. Заметно, что вокруг концов трещины находятся зоны повышенных напряжений как и на (Рис.1.8.)[12]

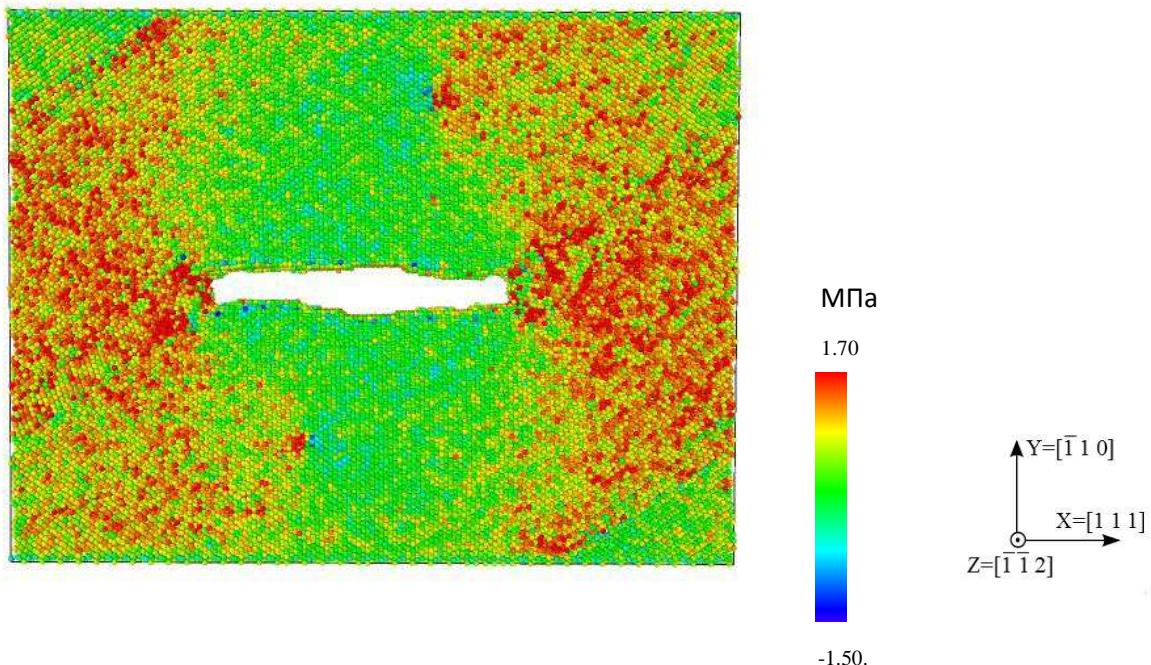


Рис.1.2. Распределение напряжений в модели со сквозной трещиной

Изначально модель расчитывалась в динамике с использованием скорости движения частиц, но из-за времени реализации (один расчет порядка 24-26 часов и таких итераций необходимо около 100) было принято решение производить расчеты статическим методом , так как такой вид реализации позволяет сократить время расчета и позволяет ограничить нежелательный шум появляющийся в поле напряжений при динамическом расчете из-за тепловых флюктуаций.

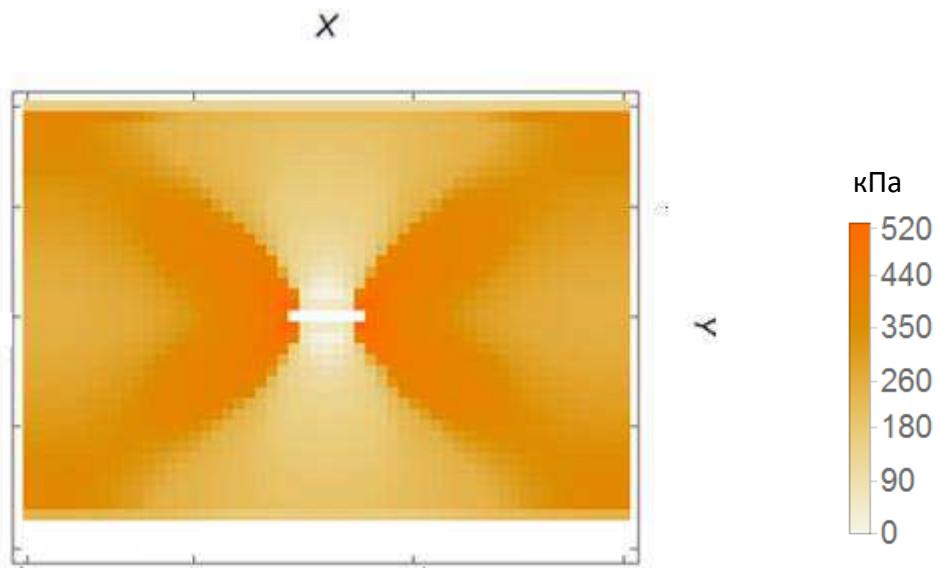


Рис.1.3. Распределение напряжений в модели со сквозной трещиной статический метод

1 Моделирование внутренней нанотрещины

В модели рассматривалась такая же решетка железа, как и в модели со сквозной нанотрещиной, но трещина располагается уже внутри самого материала и деформация происходила уже иным образом. Нами рассматривается модель ОЦК решетки α -железа с ориентацией $X [1\ 1\ 1]$ $Y [\bar{1}\ 1\ 0]$ $Z [\bar{1}\ \bar{1}\ 2]$, в которой была определена и вырезана внутренняя область. В направлении Y приложена сила 125 МПа, по оси X свободные границы, по Z периодические граничные условия. Данная постановка рассматривается для наилучшего нахождения распределения напряжений вблизи трещины.

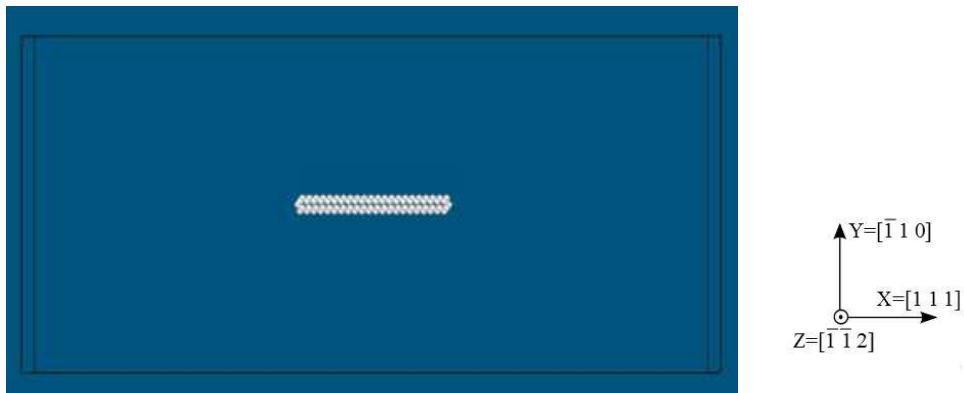


Рис.1.4.Расположение трещины в модели с внутренней трещиной

2 Сравнение с теорией.

Одним из наиболее распространенных методов расчета модели на прочность является исследование распределение напряжений и деформаций, возникающих под действием приложенных нагрузок. Особый интерес вызывает область близкая к вершине трещины.

Трещины в пластинах конечных размеров представляют огромный интерес, но для таких случаев не существует замкнутых форм решений. Эти задачи сложны из-за граничных условий. В самом общем случае распределение деформаций в окрестности произвольной точки контура трещины можно представить в виде суперпозиции трёх частных видов деформации, соответствующих трём основным видам смещения поверхностей трещины: нормального отрыва (I), поперечного (II) и продольного (III) сдвигов.

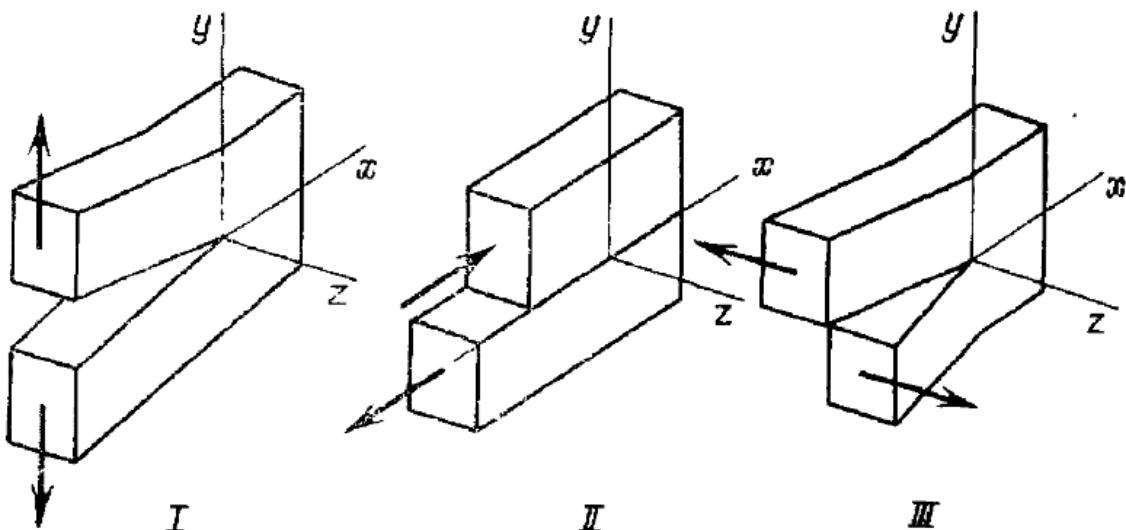


Рис.1.5.Основные виды смещений поверхности трещин.

Первый тип связан с нормальным смещением поверхностей трещины во взаимно противоположных направлениях; второй соответствует перемещениям, при которых поверхности трещины скользят друг по другу в направлении, перпендикулярном её фронту (ось z); третий связан со скольжением одной поверхности трещины по другой параллельно фронту трещины (оси z).

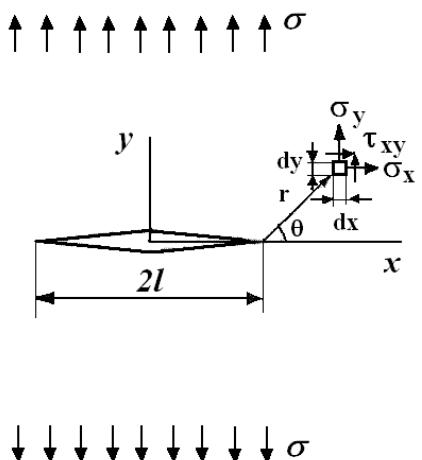


Рис.1.6. Трещина в бесконечной пластине

Пластина находится под действием растягивающего напряжения σ , которое вызывается приложенными в бесконечности силами. Элемент $dxdy$ пластины, расположенный на расстоянии r от вершины трещины и составляющий с плоскостью трещины угол θ .

Коэффициент КI называется коэффициентом интенсивности напряжений (КИН), где индекс I обозначает тип разрушения I. Когда известен КИН, поле напряжений при вершине трещины полностью определено. Важнейшая характеристика степени опасности концентратора механического напряжения, которая определяется геометрией образца и степенью его нагружения. Коэффициенты интенсивности напряжений имеют единицы измерения МПа \sqrt{m} . Для пластины конечных размеров можно найти коэффициент интенсивности напряжений по следующей формуле.[19],[14],[15]

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi \ell} \cdot f(\ell/W) \quad (1)$$

, где ℓ - длина трещины, W ее ширина, σ - внешнее приложенное напряжение

Подставив в формулу (2) КИН можем посчитать у-ую компоненту напряжения для модели при нормальном сдвиге (I случай).

$$\sigma_y = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right) \quad (2)$$

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi \ell} \cdot f\left(\frac{\ell}{W}\right) \quad (3)$$

$$\sigma_y = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right) \quad (4)$$

Сравнение с аналитикой проведено с учетом формул (3)(4)

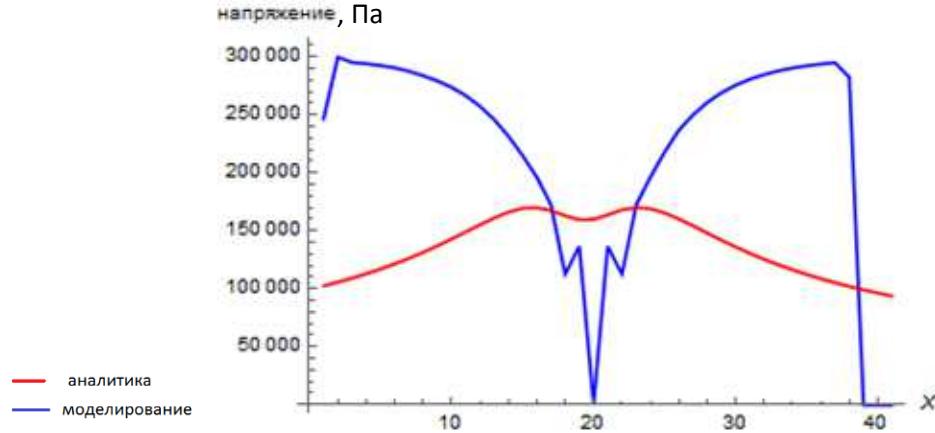


Рис.1.7. Сравнение аналитического решения и моделирования

Для других случаев:

$$\tau_{xy} = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 - \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right), \quad \tau_{yz} = \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \quad (5)$$

Было проведено моделирование трех случаев деформации и получены распределения напряжений для каждого из случаев.

I мода деформации

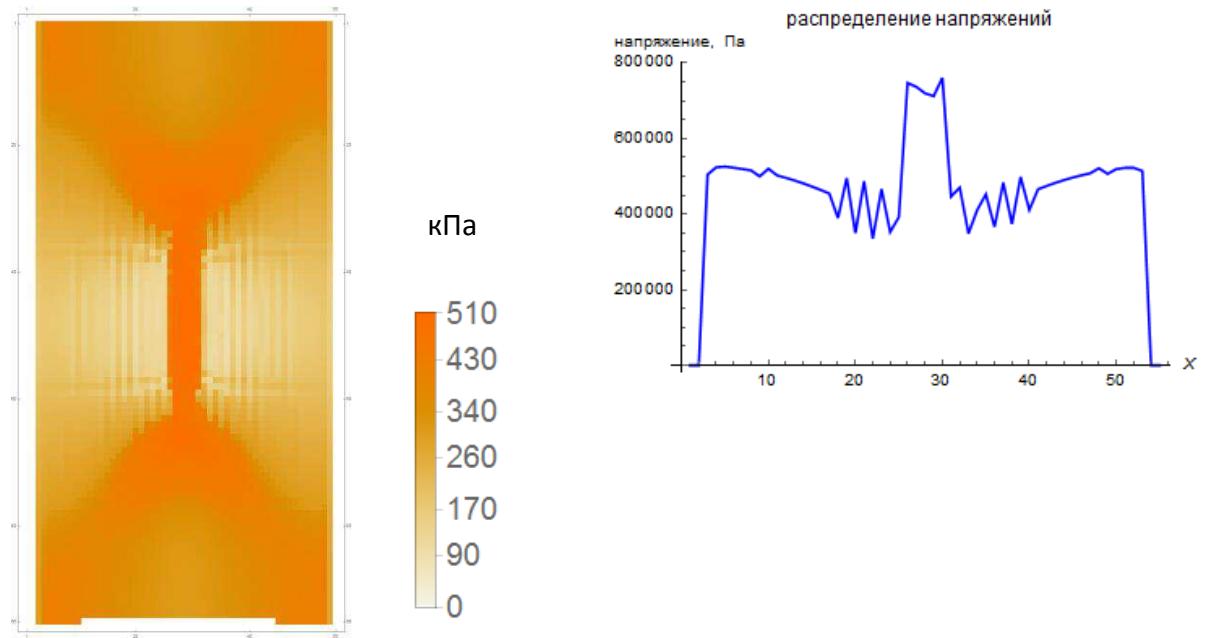


Рис.1.9 Сравнение моделирования и теории

II мода деформации

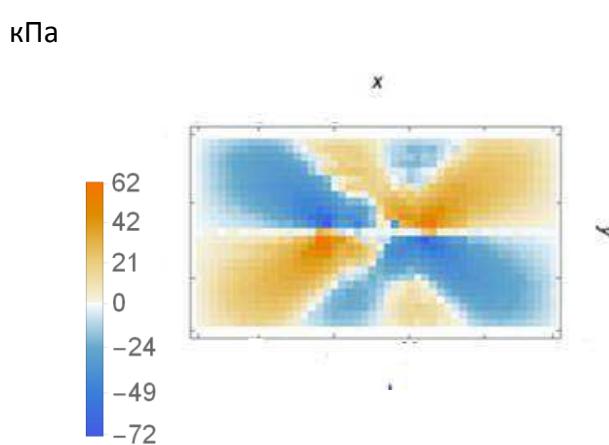


Рис.1.10.распределение напряжений

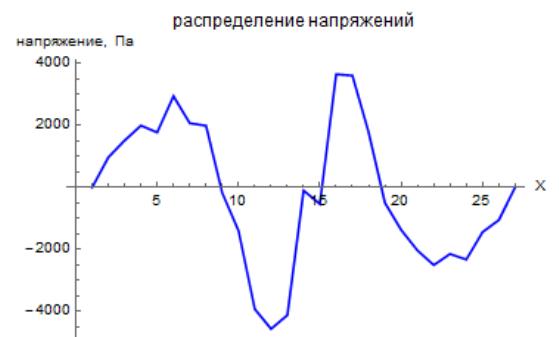


Рис.1.11.Распределение напряжений
вблизи центра трещины

III мода деформации

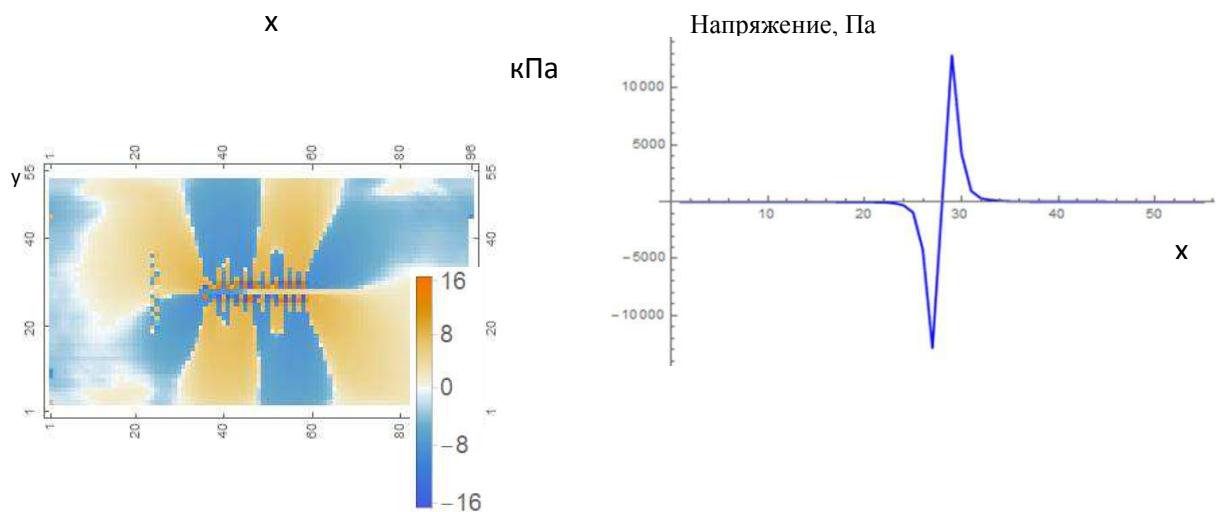


Рис.1.12. Распределение напряжений, III мода деформации

Рис.1.13. Распределение напряжений вблизи трещины

Было проведено моделирование сквозной и внутренней нанотрещины, внутренняя была рассмотрена при трех различных нагрузлениях. Был реализован метод вычислений распределений напряжений с помощью пакета Wolfram Mathematica, проведено сравнение с аналитическим решением. Показано что аналитическое решение качественно сходится, но количественно отличается существенно от значений полученных в ходе моделирования при сравнение со сквозной трещиной от $\approx 30\%$ до $\approx 60\%$ и с внутренней на $\approx 30\%$.

II. Моделирование образцов с тремя видами краевых трещин.

Так же одной из важных особенностей при расчетах на прочность элементов конструкции и сооружений с трещинами является учет возникающего перераспределения напряжений в результате образования щелей и трещин под действием внешних нагрузок. При этом именно кончик трещины является местом создания наибольшей концентрации напряжений и исходной точкой дальнейшего разрушения. Поэтому особое значение приобретает вопрос исследования напряженного состояния у кончика (вершины) трещины. Самый общий случай полей деформации и напряжений у кончика трещины можно получить путем взаимного наложения напряжений следующих частных видов деформаций (рис.2.1). Первый вид (I) связан с отрывным смещением, при котором поверхность трещины прямо расходятся одна от другой во взаимно противоположных направлениях (симметрично относительно плоскостей xy и xz). Второй вид (II) соответствует перемещениям, при которых поверхности трещины скользят друг по другу (симметрично плоскости xy , но кососимметрично относительно плоскости xz –поперечный сдвиг). Третий вид (III) связан с антипластической деформацией (разрезанием ножницами), при которой одна поверхность скользит по другой параллельно направляющему фронту трещины (кососимметричная деформация относительно плоскостей xy и xz – (продольный сдвиг)

Для расчета модели в программе LAMMPS были использованы потенциалы [8] и статический метод расчета, для наилучшего использования ресурсов в зависимости от времени. Статический метод отличается от динамического тем , что в статике атомы не двигаются и итерации не имеют явного физического смысла, так как нет привязки к времени.

Схема расчета: вдоль x - свободные ГУ, на граница по y приложена нагрузка, казистатическое нагружение с возвращающим напряжением от 0 до S_{max} с максимальной деформацией 5%. Мы смещаем на малые расстояния приграничные области атомов, после каждого смещения происходит минимизация. Для того, чтобы области не возвращались обратно, мы обнуляем силы действующие вдоль оси Y на атомы в этих областях.

Размеры модели:

Рассматривается ОЦК решетка размеры в ангстремах (10^{-10}) с ориентацией **X** [1 1 1]
Y [$\bar{1} 1 0$] **Z**[$\bar{1} \bar{1} 2$]

по оси **X** длина модели составляет 240.26223 Å

по оси **Y** высота модели составляет 615.319962 Å

по оси **Z** ширина модели составляет 72.6843394 Å

Размеры трещинцы: **X** 107 Å; **Y** 3 Å; **Z** 72.6 Å;

I мода

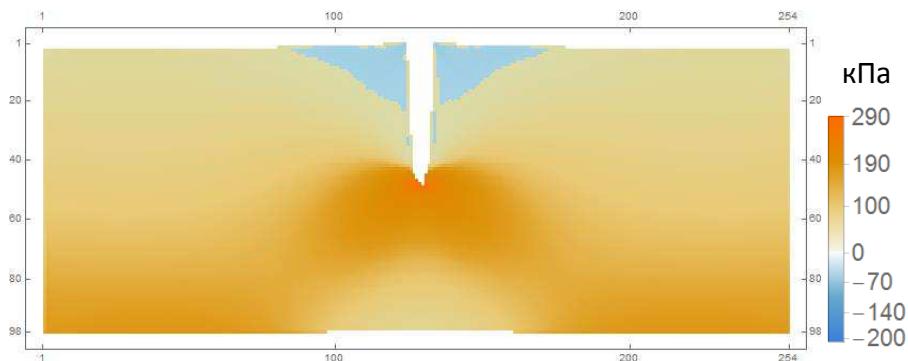


Рис.2.1.Распределение напряжений 1 вид краевой трещины статический расчет

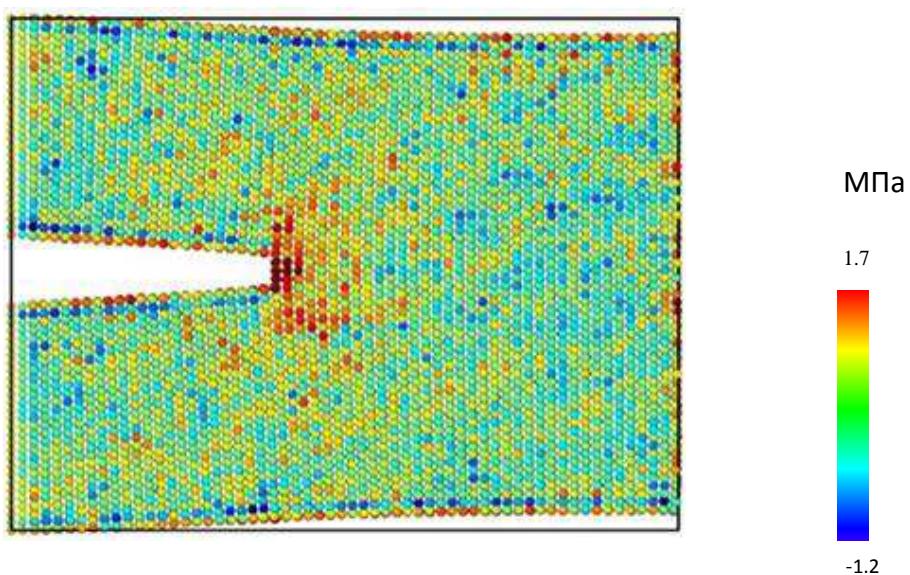


Рис.2.2.распределение напряжений 1 вид трещины динамический расчет

Если воспользоваться законом Гука и выразить из смещения u, v через напряжения, определяемые соотношениями, то получим следующие выражения для случая плоской деформации[23].

$$u = \frac{1+\nu}{E} [(1-2\nu)ReZ_1^0 - yImZ_1] \quad (Z_1 = \frac{dZ_1^0}{dz}) \quad (8)$$

$$v = \frac{1+\nu}{E} [(1-\nu)ImZ_1^0 - yReZ_1]$$

пусть теперь

$$\Phi(z) = -\frac{1}{2}iZ_2(z), \Psi(z) = \frac{1}{2}izZ'_2 + iZ_2 \quad (9)$$

$$\text{При } \sigma_x + \sigma_y = 2ImZ_2, \sigma_x - \sigma_y = -2ImZ_2 - 2yReZ'_2 \quad \tau_{xy} = ReZ_2 - yImZ'_2 \quad (10)$$

Это решение обладает тем свойством, что вдоль линии $y=0$ $\sigma_y=0$.Аналогично предыдущему определению смещений.

$$w = \frac{1+\nu}{E} [2(1-\nu)ImZ_2^0 - yReZ_2] \quad (Z_2 = \frac{dZ_2^0}{dz}) \quad (11)$$

$$v = \frac{1+\nu}{E} [-(1-2\nu)ReZ_2^0 - yImZ_2]$$

Если рассматривать решение Вестерграда для этого случая, то выберем функцию Z_1 , аналитическую во всей области за исключением некоторого отрезка действительной оси, в следующем виде:

$$Z_1 = \frac{g(z)}{\sqrt{(z-a)(z-b)}} \quad (12)$$

Это выражение в случае достаточно гладкой функции $g(z)$ Обеспечивает решение задачи о трещине, расположенной вдоль действительной оси $a < x < b$, $y=0$, так как на этом отрезке $\sigma_y = \tau_{xy} = 0$. Отсюда следует, что

$$\text{Im } g(x)=0 \quad (a < x < b). \quad (13)$$

Например, функция дающая решение задачи о трещине, растягиваемой на бесконечности нормальным напряжением p и свободой от напряжений на интервале – $l < x < l$, $y=0$. Имеет вид

$$Z_1 = \frac{pz}{\sqrt{x^2 - l^2}} \quad (14)$$

Сделаем теперь в выражении (12) замену переменной $\xi = z - b$, тогда

$$Z_1 = f(\xi)\xi^{-1/2} \quad (15)$$

В окрестности кончика трещины $x=b$, т.е. при малых значениях $|\xi|$, из (12) и (13) следует, что функции $f(\xi)$, остаточно гладкая, и ее при $|\xi| \rightarrow 0$ можно заменить действительной постоянной $Z_1|_{|\xi| \rightarrow 0} = K_I \sqrt{2\pi\xi}$. Отсюда следует

$$K_I = \lim_{|\xi| \rightarrow 0} \sqrt{2\pi\xi} Z_1 \quad (16)$$

Подставим (16) в (17) и перейдем в этих соотношениях к полярным координатам $\xi = re^{i\theta}$ (рис.2.2). Тогда, отбрасывая члены более высокого порядка по сравнению с r , легко получаем формулы для полей напряжений, дающие хорошее приближение в области, где r мало по сравнению, например с длиной трещины.

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 - \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right), \\ \sigma_y &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right), \\ \sigma_z &= \nu(\sigma_x + \sigma_y), \end{aligned} \quad (17)$$

$$\tau_{xy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{3\theta}{2}, \quad \tau_{xz} = \tau_{yz} = 0$$

Смещения в окрестности кончика трещины получим в результате подстановки (16) в (8) и перехода к полярным координатам:

$$u = \frac{K_I}{\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 - 2\nu + \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)$$

$$\nu = \frac{K_I}{\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin \frac{\theta}{2} (1 - 2\nu + \sin^2 \frac{\theta}{2}) \quad (18)$$

Соотношения (16),(17) и (18) представляют собой асимптотические выражения полей напряжений и деформаций в окрестности кончика трещины для первого вида деформаций, связанного с отрывным смещением

Перейдем ко второму виду деформаций при котором поверхности трещины скользят друг по другу. Аналогично предыдущему заключаем, что при $|\xi| \rightarrow 0$ в окрестности кончика трещины $Z_1|_{|\xi| \rightarrow 0} = K_I \sqrt{2\pi\xi}$ откуда

$$K_I = \lim_{|\xi| \rightarrow 0} \sqrt{2\pi\xi} Z_1 \quad (19)$$

Подставив (19) в (10) и (11), получаем в полярных координатах следующие асимптотические представления для этого случая деформации:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= -\frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \sin \frac{\theta}{2} (2 + \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{3\theta}{2}) \\ \sigma_y &= \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{3\theta}{2} \\ \sigma_z &= \nu(\sigma_x + \sigma_y) \\ \tau_{xy} &= \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} (1 - \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2}) \\ \tau_{xz} &= \tau_{yz} = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

$$u = \frac{K_{II}}{\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin \frac{\theta}{2} (2 - 2\nu + \cos^2 \frac{\theta}{2}) \quad (21)$$

$$u = \frac{K_{II}}{\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \cos \frac{\theta}{2} (2\nu - 1 + \sin^2 \frac{\theta}{2}), \quad w = 0$$

Если рассмотреть плоскую задачу в целом, то коэффициенты интенсивности напряжений определяются следующим выражением:

$$K_I + iK_{II} = \lim_{x \rightarrow +0, y=0} [\sqrt{2\pi x} (\sigma_y + i\tau_{xy})]$$

последний из указанных выше частных случаев связан с антиплоской деформацией, при которой одна поверхность скользит по другой параллельно фронту трещины. В этом случае $w=w(x,y)$ – единственная отличная от нуля компонента смещения ($u=v=0$), а уравнения равновесия и закон Гука принимают следующий вид:

$$\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} = 0 \quad (22)$$

$$\tau_{xz} = \mu \gamma_{xz} = \mu \frac{\partial w}{\partial x}, \tau_{yz} = \mu \gamma_{yz} = \mu \frac{\partial w}{\partial y} \quad (23)$$

откуда следует, что при подстановке (23) в (22) смещение удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\Delta w = 0 \quad (24)$$

Если выбрать $w=w(x,y)$ в виде

$$w = \frac{1}{\mu} \operatorname{Im} Z_3 \quad (25)$$

то из (23) получаем

$$\tau_{xz} = \operatorname{Im} Z'_3, \quad \tau_{yz} = \operatorname{Re} Z'_3 \quad (26)$$

В окрестности кончика трещины ($y=0, x<0$) с вершиной в точке $x=y=0$ функция напряжений Z_3 имеет вид $Z_3|_{|\xi| \rightarrow 0} = K_{III} \sqrt{2\pi\xi}$, откуда

$$K_{III} = \lim_{|\xi| \rightarrow 0} \sqrt{2\pi\xi} Z_3 \quad (27)$$

Подставив (27) в (25),(26), получаем выражения для смещений и напряжений у кончика трещины в случае антиплоской деформации:

$$\tau_{xz} = \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \sin \frac{\theta}{2}, \quad \tau_{yz} = \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2}, \quad \sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = \tau_{xy} = 0 \quad (28)$$

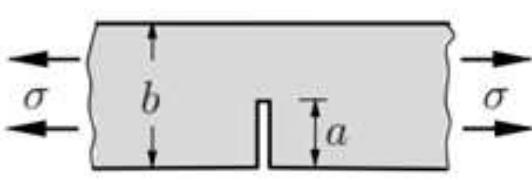
$$w = \frac{K_{III}}{\mu} \sqrt{\frac{2r}{\pi}} \sin \frac{\theta}{2}, u = v = 0 \quad (29)$$

Полученные соотношения содержат величины K_I, K_{II}, K_{III} , называемые коэффициентами интенсивности напряжений для трех указанных выше видов

деформаций. Эти коэффициенты играют исключительно важную роль в механике хрупкого разрушения.

Часто коэффициенты интенсивности напряжений обозначают символом K без индекса вида деформаций, имея при этом в виду, что вид деформации либо ясен из задачи, либо коэффициент может быть отнесен к любому виду.

Для случая трещины сдвига была получена следующая, уже усовершенствованная формула(30)[22] , где G_I коэффициент полученный экспериментальным путем.



$$K_I = \sigma \sqrt{\pi a} \sqrt{\frac{2b}{\pi a} \tan \frac{\pi a}{2b}} G_I(a/b) \quad (30)$$

$$G_I = \frac{0.752 + 2.02 \frac{a}{b} + 0.37(1 - \sin \frac{\pi a}{2b})^3}{\cos \frac{\pi a}{2b}}$$

Рис.2.2.1 показан вид деформации при I mode (трещина сдвига)

Был рассмотрен случай I вида деформации. Результатом моделирования стали значения напряжений σ_{yy} , которые были приведены в общей области (рис.2.3.)

Проведено сравнение со значениями напряжений полученных при расчете с помощью пакета Wolfram Mathematika с помощью формулы (30).

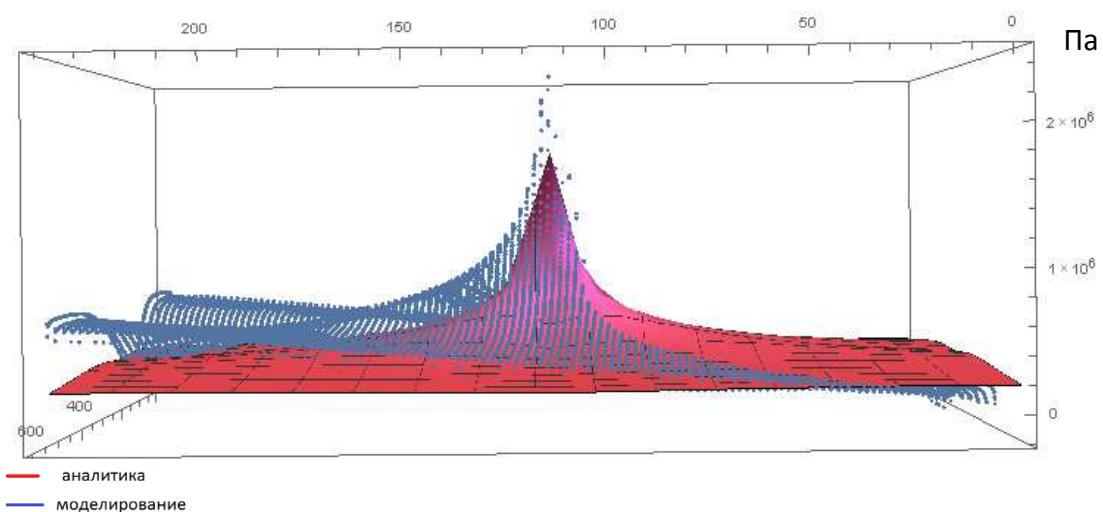


Рис.2.3. Сопоставление полученных значений для теоретических и практических значений.

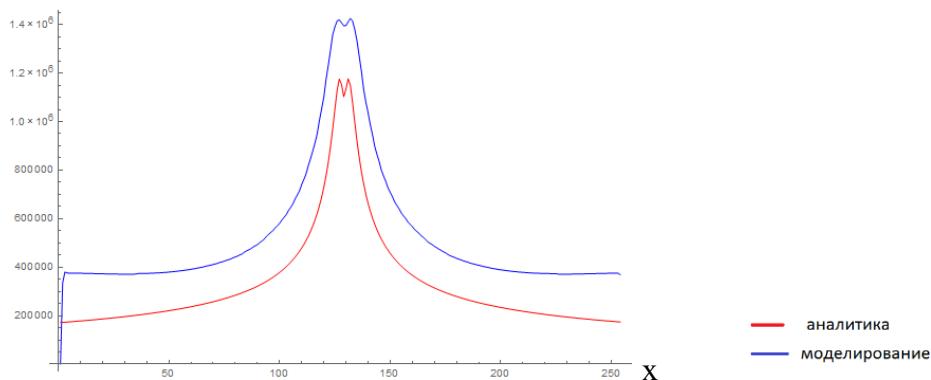


Рис.2.4. сравнение практических и аналитики в сечение перпендикулярно x

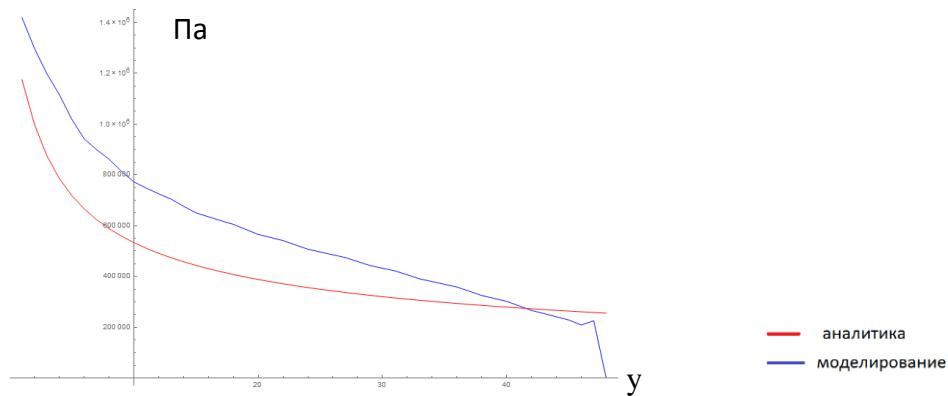


Рис.2.5. сравнение практических и теоретических значений сечение перпендикулярно Y (1/2 модели)

Как видно из рис.2.4 и рис.2.5 результат, полученный по формуле (30) качественно согласуется с результатами молекулярно-динамического моделирования, количественное различие составляет $\approx 20\%$. При этом напряжения полученные в МД выше, максимальные составляют $2e+06$ МПа. Можно сделать вывод, что в целом моделирование можно считать успешным показателем и описанием теоретических расчетов.

Так же были построены модели для 2 и 3 случая, и построены распределения напряжений(рис.2.6., рис.2.7.)

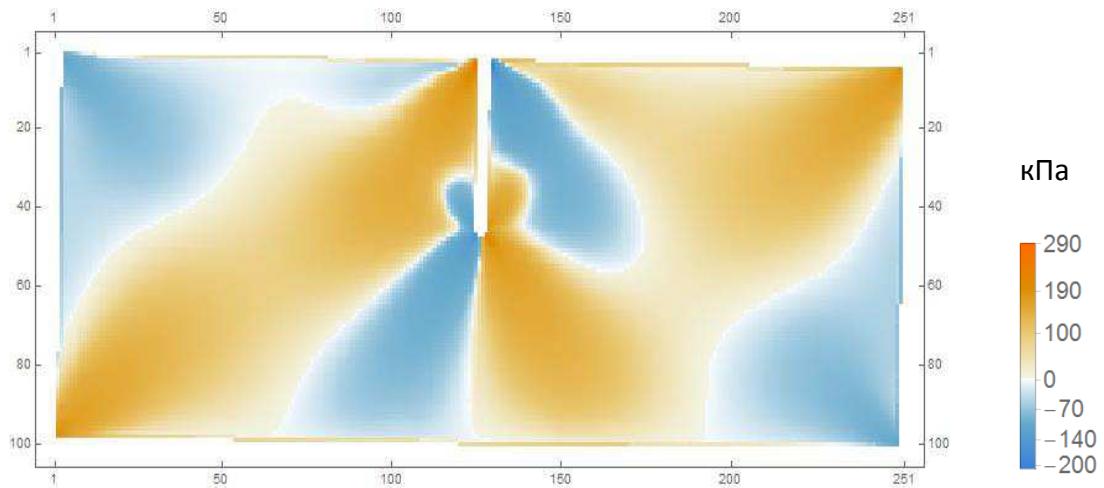


Рис.2.6. Распределение напряжений II мода деформации

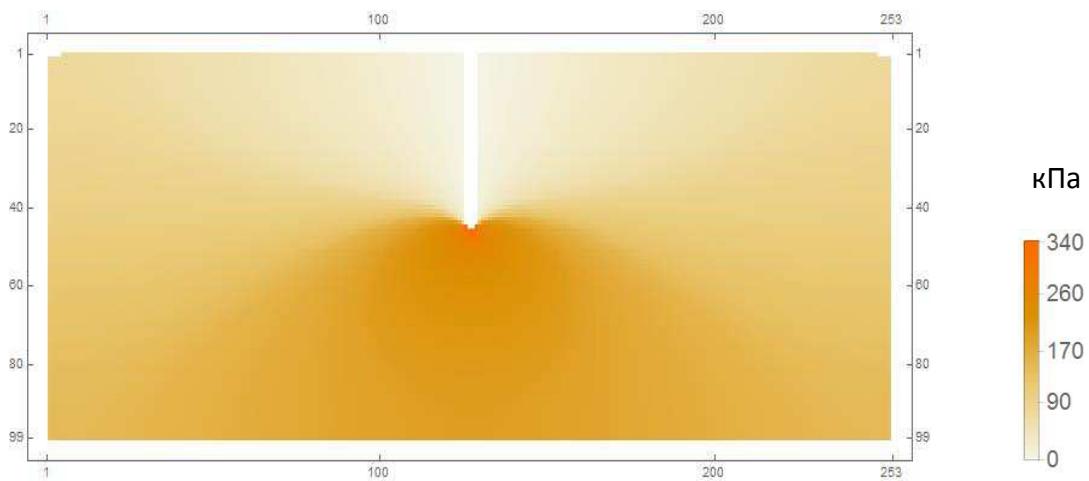


Рис.2.7. Распределение напряжений III мода деформации

Современные материалы имеют сложное и не однородное строение. Численные методы позволяют рассматривать ансамбли, состоящие из большого количества частиц или узлов сетки, предоставляя возможность решать нелинейные задачи со многими переменными. Моделирование наноразмерных образцов с использованием с метода конечных элементов (МКЭ) рассматривается во многих работах [26],[27] и является одним из самых распространенных методов решения задач о разрушении и деформировании материалов. Вследствие чего было решено попытаться сравнить полученные результаты (МД моделирование) с МКЭ моделью. При этом для получения высокой точности численных решений необходимо развитие моделей межэлементного взаимодействия, учитывающих важнейшие особенности моделируемой среды. Развитие численных методов шло двумя путями. Развитие

континуального подхода привело к тому, что многие математические модели описываются дифференциальным уравнением или системой дифференциальных уравнений с краевыми условиями первого, второго и третьего рода. Однако, точное решение краевых задач удается получить лишь для немногих частных случаев. Поэтому общий способ их решения заключается в использовании различных приближенных моделей. В настоящее время широкое распространение получили модели на основе интегральных уравнений и модели на основе метода сеток – метод конечных разностей и метод конечных элементов. Эти методы позволяют решать не только задачи механики деформируемого твёрдого тела, но и задачи описываемые системой дифференциальных уравнений – задачи гидродинамики, теплопередачи и др. Однако их существенным недостатком являются сложности при учёте процессов образования повреждений и разрушения материала. Отметим, что в настоящее время эти проблемы частично решаются в рамках так называемых «безсеточных» методов механики сплошной среды. Отсутствие достоверной информации о механических свойствах породы. Сложность геомеханических и физических процессов (нелинейность, не стационарность, и т.д.). Можно провести сравнительный анализ молекулярно динамического моделирования(LAMMPS) и метода конечных элементов(ABAQUS)

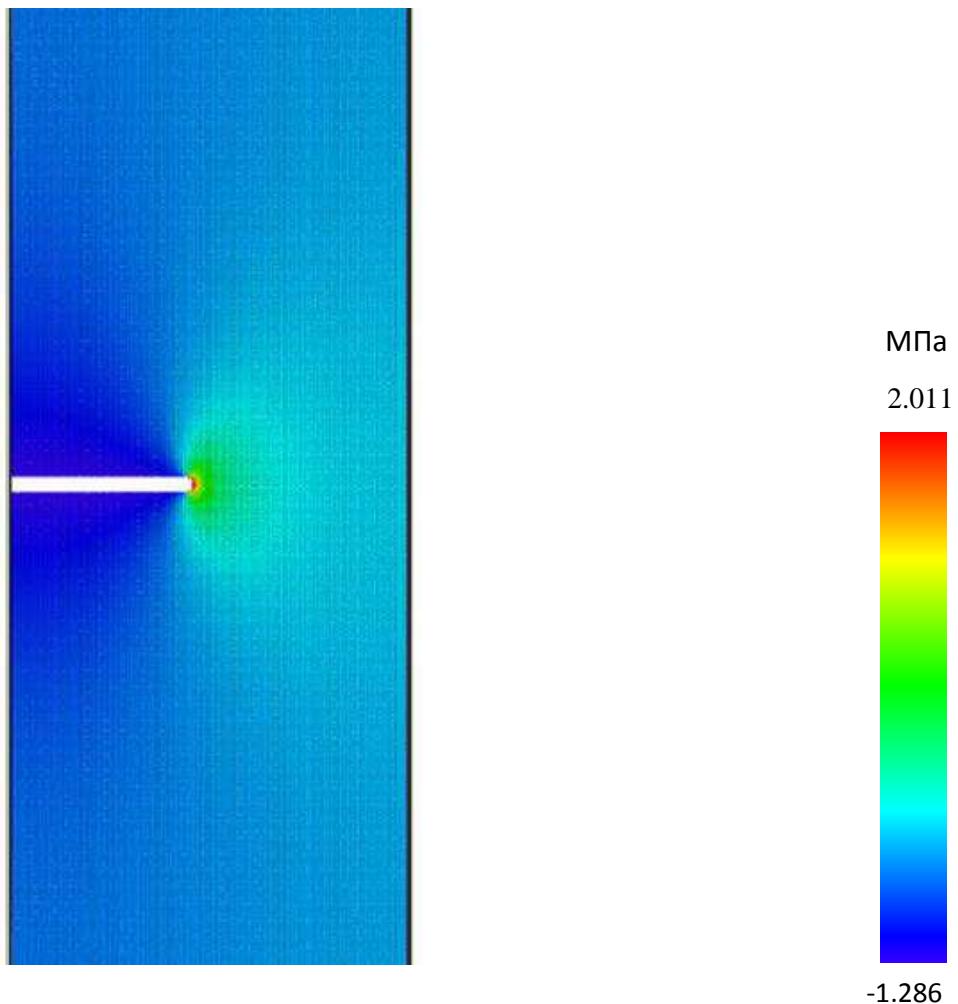


рис.2.8.Молекулярно динамическая модель LAMMPS начальное положение

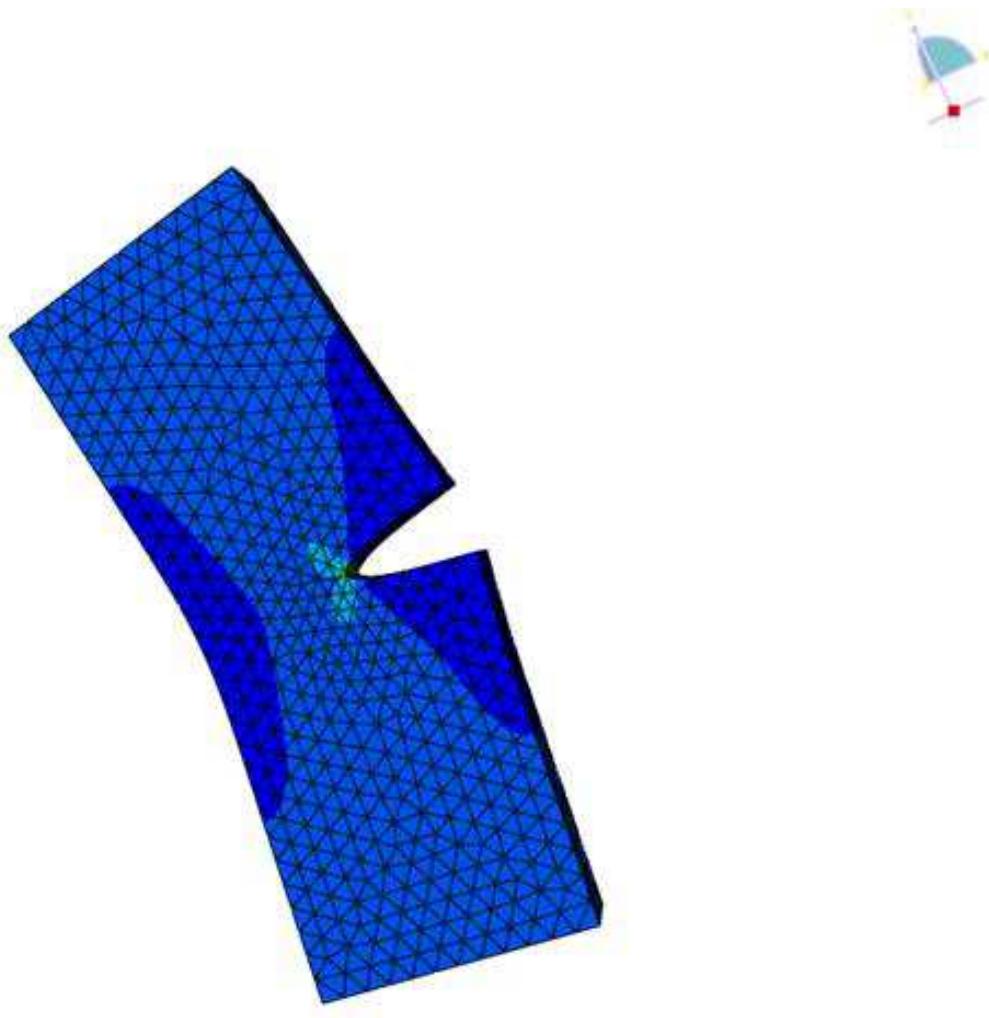


Рис.2.9. МКЭ модель ABAQUS максимальное нагружение

Упругие модули которые используются в потенциале, который я подключаю к расчету[8] C11 243.4, C12 145, C44 116.0 из таблицы 1.1.

При рассмотрении результатов двух видов моделирования (рис.2.8. и 2.9) можно сделать вывод, что при моделировании методом молекурной динамики и методом конечных элементов, значения совпадают в вершине трещины, то есть максимальное напряжение составляют $1.5e+06$ МПа у вершины трещины для МКЭ модели и $2e+06$ МПа (рис.2.3.) при динамическом расчете в пакете LAMMPS. Значит МД метод может быть реализуемым для описания модели разрушения или деформирования материала.

При температуре T ниже точки Кюри Q ферромагнетики обладают самопроизвольной (спонтанной) намагниченностью и определённой магнитно-кристаллической симметрией. В точке Кюри ($T=Q$) интенсивность теплового движения атомов ферромагнетика оказывается достаточной для разрушения его самопроизвольной намагниченности («магнитного порядка») и изменения симметрии, в результате ферромагнетик становится парамагнетиком. Аналогично у антиферромагнетиков при $T=Q$ (в так называемой антиферромагнитной точке Кюри или точке Нееля) происходит разрушение характерной для них магнитной структуры (магнитных подрешёток), и антиферромагнетики становятся парамагнетиками. В сегнетоэлектриках и антисегнетоэлектриках при $T=Q$ тепловое движение атомов сводит к нулю самопроизвольную упорядоченную ориентацию электрических диполей элементарных ячеек кристаллической решётки. В упорядоченных сплавах в точке Кюри (её называют в случае сплавов также точкой Курнакова) степень дальнего порядка в расположении атомов (ионов) компонентов сплава становится равной нулю. Но так же варируется значение температур вблизи точки Кюри .

В случаях фазовых переходов II рода [17] (типа точки Кюри) при $T=Q$ в веществе происходит исчезновение того или иного вида атомного «порядка» (упорядоченной ориентации магнитных или электрических моментов, дальнего порядка в распределении атомов по узлам кристаллической решётки в сплавах и т. п.). Вблизи точки Кюри в веществе происходят специфические изменения многих физических свойств (например, теплоёмкости, магнитной восприимчивости и др.), достигающие максимума при $T=Q$, что обычно и используется для точного определения температуры фазового перехода.

При изменении давления точка Кюри материалов смещается. С ростом давления на кристаллическую структуру объём последней уменьшается. Давление напрямую влияет на кинетическую энергию частиц, усиливая их движение, что вызывает вибрации и нарушает упорядоченность магнитных моментов подобно повышению температуры[5]

Нами рассматриваются образцы при различных температурах до точки Кюри (300 K, 600K, 800K) в Кельвинах.

1 мода	300 К	2 нм/нс
	600 К	3 нм/нс
	800 К	3.5 нм/нс
2 мода	300 К	2 нм/нс
	600 К	3.4 нм/нс
	800 К	4.5 нм/нс
3 мода	300 К	3.6 нм/нс
	600 К	5 нм/нс
	800 К	5.2 нм/нс

Получены значение скоростей раскрытия трещины при различных температурах. Можно заметить, что при больших температурах скорость раскрытия трещины увеличивается в зависимости от вида деформации.

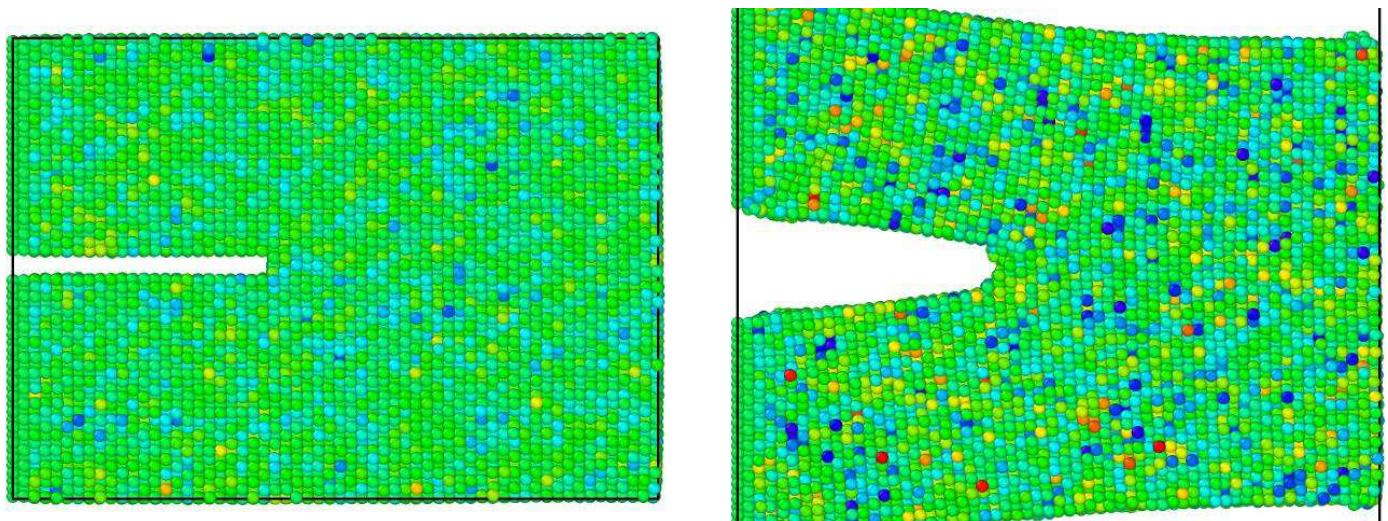


Рис.2.10 Сравнение положения трещины при 0 деформации и 100% деформации , случай при 800К

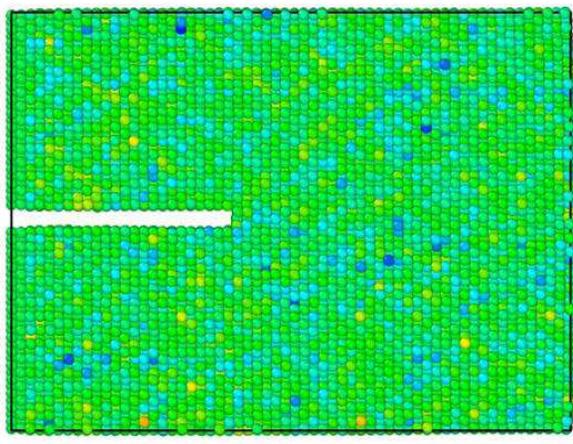


Рис.2.11 Распределение напряжений для случая 2 моды деформации начальная стадия

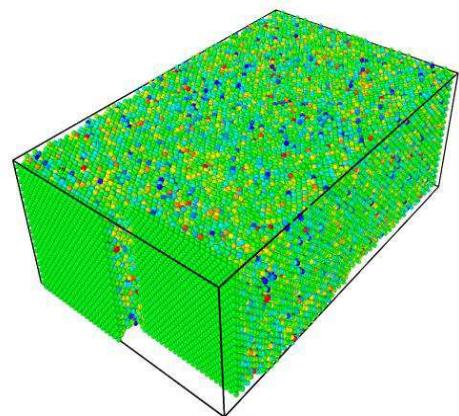


Рис.2.12 Распределение напряжений для случая 2 моды деформации 800 К

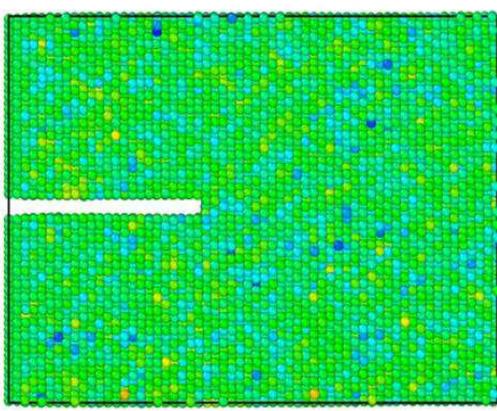
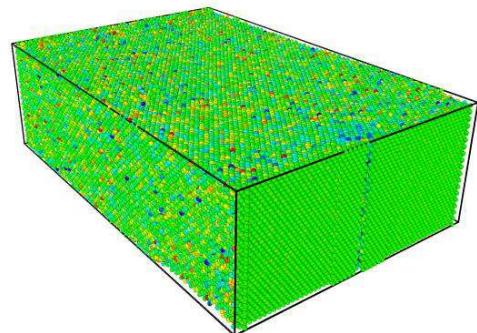


Рис.2.13 распределение напряжений в начальный и конечный момент, 3 мода деформации 800К



При сравнении скоростей деформации в зависимости от температуры можно сделать вывод, что при больших температурах происходит деформация, которая отличается в 1,5 раза.

Для первой моды увеличивается от 2 нм/нсек при 300 К до 3.5 нм/нс при 800 К.

Для второй моды увеличивается от 2 нм/нсек при 300 К до 4.5 нм/нс при 800 К.

Для третьей моды увеличивается от 3.6 нм/нсек при 300 К до 5.2 нм/нс при 800 К.

Интегральные критерии, базирующиеся на представлениях о перераспределении внутренних усилий в зонах накопленных повреждений и нелинейных деформаций, включают в качестве определяющих параметров интегральные характеристики напряженно-деформированного состояния. Локальные критерии механики разрушения базируются на характеристиках напряженного, деформированного или энергетического состояния в особых точках материала, таких как зоны концентрации напряжений, вершины трещин. Положения и методологическая база использования интегральных и локальных критериев при анализе несущей способности элементов технических систем требует дальнейшего развития, учитывая многокритериальный аспект проблемы. Особенно это важно для конструкций, изготовленных из структурно-неоднородных материалов (композиционные материалы на металлической основе, биметаллы, литые изделия с технологическими дефектами). Для конструкций, выполненных из композиционных материалов, наличие более или менее значительных зон разрушения если и не является нормальным явлением, то, по крайней мере, далеко не всегда приводит к фатальным последствиям. Однако, при проектировании ответственных объектов, наличие подобных зон должно быть учтено, а также проанализирована возможность их дальнейшего развития и влияния на несущую способность конструкции в целом.

III. Моделирование образца со сквозной трещиной и включение графена.

1. Графен и его свойства

Как известно, самым прочным материалом в мире является графен, открытый в начале нынешнего века. При этом прочность является далеко не единственной его выдающейся характеристикой, но для нас первостепенной; к числу других достоинств материала относятся, например, его структура, физические свойства и электрическая проводимость. Последняя намного выше, чем у кремния, что даёт потенциальную возможность использовать графен для производства процессоров, микросхем и прочих электронных компонентов. Графен может существовать в виде пленки толщиной всего в один атом, и по своему строению напоминает пчелиные соты. Данный материал является двумерным, состоящим из одиночного слоя атомов углерода, собранных в гексагональную решётку. Пример решетки(Рис.3.1.). Но все-таки основным свойством графена остается способность упрочнять материал с помощью

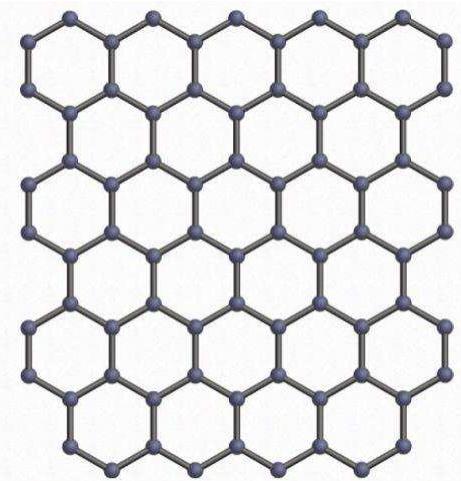


Рис.3.1. Структура графена

2. Модель α -железа с включением графена.

Рассматривается модель ОЦК решетки с ориентацией $X [1\ 1\ 0]\ Y [0\ 0\ 1]\ Z [1\ \bar{1}\ 0]$ размеры длина 120 Å; высота 112.7 Å ;ширина 102.9 Å

Реализация модели в LAMMPS:

Нами рассматривается Для того чтобы в нашей модели помимо железа так же присутствовал необходимый для наших расчетов графен, создаем файл Gener Gr., в котором задаем диаметр пластинки и вектор нормали, вычисляем матрицу поворота вектора 0 0 1 к заданному. При помощи матрицы поворота определяем векторы смещения от базисных атомов для генерации решётки графена. Генерируем решётку, удаляем лишние атомы железа. Фиксируем три верхних и три нижних ряда атомов, делаем минимизацию в статики для получившейся модели с включением графена, для этого создается файл Min2 и используется метод градиентов в модификации Полака-Рибьера. В файле Equil происходит приведение к динамическому равновесию. Силы воздействия задаются в финальном файле Tensile как и в прошлых модификациях. Вид пластинки графена радиусом R=40A; на рис.3.1. Из рис.3.2. можно увидеть форму пластинки и ее расположение в модели.

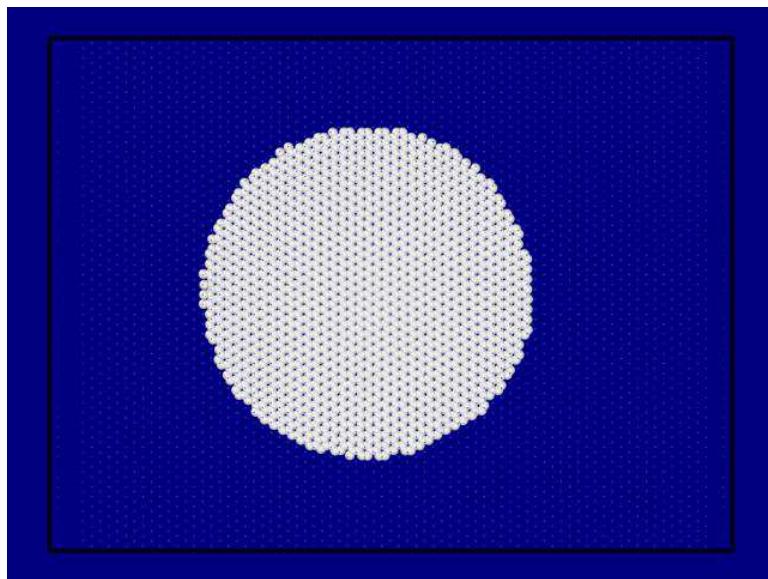


Рис.3.1.пластинка графена

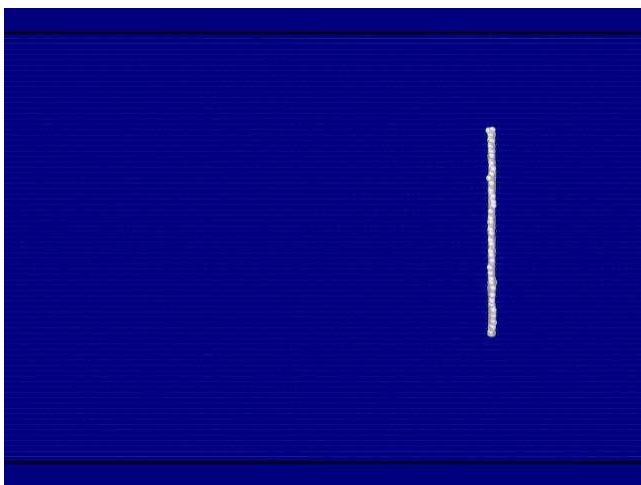
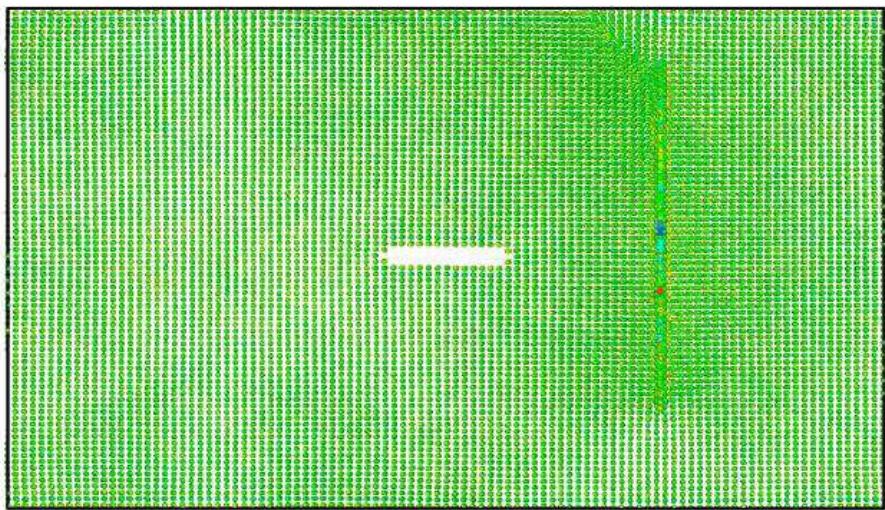


Рис.3.2.пластинка графена расположение в модели

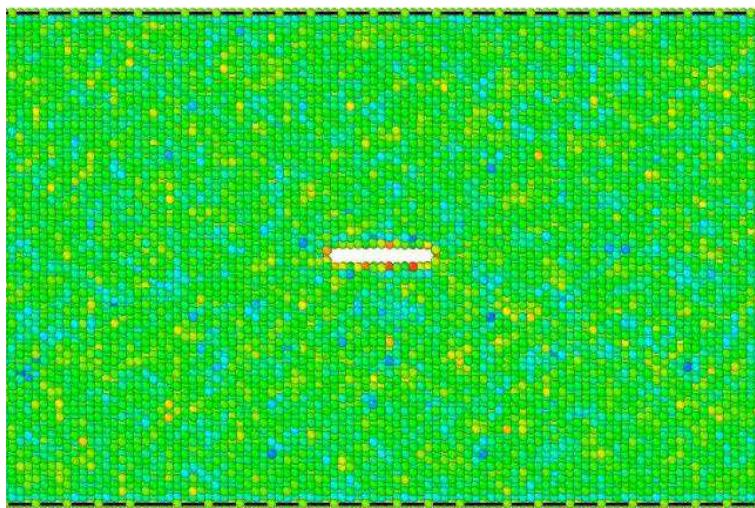
Прочность идеальных материалов определяется силами связи между правильно расположеными атомами. Стого определить эти силы затруднительно ввиду необходимости учитывать взаимодействие многих атомов. В металлах атомы располагаются в узлах кристаллической решетки. Для оценки теоретической прочности металлов можно рассмотреть напряженноемсостояние. Было решено сравнить напряженное состояния образцов с графеном и без, чтобы убедиться что при внедрении пластинки графена прочностные характеристики материала возрастают

При построение модели со сквозной трещиной после создания модели Gener Perfect создается файл допустим Gener Crack, в котором задается размер трещины и вырезается определенное количество частиц.



мин напряжения -1.7 МПа

Рис.3.4. Распределение напряжений в модели с включением графена



минимальные напряжения -2.1 МПа

Рис.3.5. Распределение напряжений в модели без включением графена

При проведении исследований можно сделать вывод, что минимальные напряжения в модели с внедрением графена значительно меньше, трещина развивается медленнее чем в образце без графена и максимальные напряжения значительно меньше в образце с графеном. Разрушение происходит в 2,5 больше

- Без графена 4 МПа
- С графеном 3.7 МПа

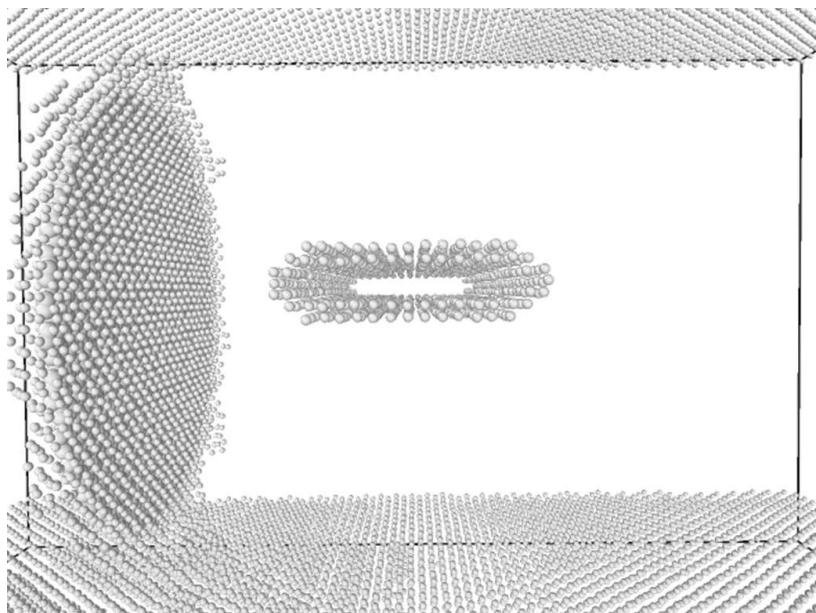


Рис.3.6. Внутреннее строение образца (атомное) со сквозной трещиной и с включением графена.

Заключение

- Проведено моделирование внутренней и сквозной трещины в образце альфа железа при температуре 300 К и получено распределение напряжений для образцов.
- Проведено сравнение напряженных состояний в плоскости трещины полученных методом МД и по аналитическим формулам, показано что решения качественно сходятся, но количественно отличаются существенно, при моделировании сквозной трещины от $\approx 30\%$ до $\approx 60\%$, внутренней на $\approx 30\%$.
- Исследовано развитие краевых трещин в образце α – железа.

Проведено сравнение с аналитической моделью, результаты качественно согласуются с результатами МД моделирования, количественное отличие составляет $\approx 20\%$. Максимальные напряжение полученные в МД выше и составляют 2 МПа.

- При сравнении результатов, полученных методами МД и МКЭ для краевой трещины, значения максимальных напряжений имеют расхождения $\approx 25\%$
- Была получена зависимость скорости раскрытия трещины от температуры и показано, что с увеличением температуры скорость увеличивается до 2,25 раз.
- В ходе исследований выявлено, что внедрение графенового листа перпендикулярно плоскости трещины уменьшает максимальные напряжения в образце на $\approx 20\%$ и замедляет развитие трещины в 2.5 раза.

IV. Список литературы

1. Griffith A.A. The phenomenon of rupture and flow in solids. Phil. Trans. Roy.
2. Westergaard H.M. Bearing pressures on cracks // ASTM Trans. J. Appl. Mech. 1939. N 6. P. A49-A53.
3. Sneddon I.N. The distribution of stress in the neighborhood of a crack in an elastic solid. Proc. Roy. Soc. Ser. A. 1946. V. 187. P. 229-260.
4. Bose, S. K.; Kudrnovský, J.; Drchal, V.; Turek, I. (1 November 2011). «Pressure dependence of Curie temperature and resistivity in complex Heusler alloys». Physical Review B 84 (17)
5. Irvin G.R. Fracture dynamics // Fract. Met., American Society of Metals. 1946. P. 147-166.
6. Orowan E. Energy criteria of fracture // Weld. Res. Suppl. 1955. V. 20. P. 1575.
7. "LAMMPS Molecular Dynamics Simulator". Sandia National Laboratories.2010
8. M.I. Mendelev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun, M. Asta
“Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron” – Phil. Mag., 83, 2003, p. 3977.
9. M.S. Daw, M.I.Baskes “Embedded-atom method:Derivation and application to impurities, surfaces and other defect in metals”-Phys.Rev.B,29,1984, стр 6443
10. B.-J. Lee, J.W. Lee “A modified embedded atom method interatomic potential for carbon” – Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 29, 2005, p.
11. M.S. Daw, S.M. Foiles and M.I. Baskes «The Embedded Atom Method: A review of Theory and Applications»//Mater.Sci.Rep.9,251-310(1993)
12. B.-J. Lee, J.W. Lee “A modified embedded atom method interatomic potential for carbon” – Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 29, 2005, p.7.
13. Фрейдин А.Б.Механика разрушения. Задача Эшелби: учеб. Пособие СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. - 2010. - 236 с.
14. Качанов Л.М. Основы механики разрушения. – М.: Наука, 1974. – 312 с.
15. Д.А.Жеребцов Г.П. Черепанов Механика хрупкого разрушения. – М.: Наука, 1974. 640 с

16. В.А.Пальмов Теория определяющих уравнений в нелинейной термомеханике деформируемых тел
17. Д.А. Жеребцов, С.А. Арчугов, Г.Г. Михайлов Фазовые переходы железа.
18. D.S.Balint, J.W.Hutchinson Mode II Edge Delamination of Compressed Thin Films.
Division of Engineering and Applied Sciences, Harvard University, Cambridge. 2001
19. Е.А. Николаева. «Основы механики разрушения»
20. Molecular dynamics simulations of quasi-brittle crack development in iron V.A. Borodin a,b,†, P.V. Vladimirov
21. Кошелев, Нарбут механика деформируемого твердого тела
22. Dietmar Gross Thomas « Seelig Fracture Mechanics (With an Introduction to Micromechanics)» Darmstadt, 2006
23. Парトン В.З., Морозов Е.М. Механика упругопластического разрушения. 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. литературы, 1985. — 504 с.
24. Седов механика сплошной среды 2 том М.: Наука, 1970. - 568с.
25. Мураками Ю. (ред.) Справочник по коэффициентам интенсивности напряжений (в 2-х томах) 1. - М.: Мир, 1990. — 448 с.
26. Расчет тепловых деформаций и напряжений в многослойныхnanoструктурах оптических узлов для космической техники. Виноградов А. Н., Духовенский Г. Е., Матвеев Е. В. С. 191-196
27. Ловецкий К.П., Севастьянов Л.А., Бикеев О.Н., Горобец А.П., Хавруняк И.В. Математическое моделирование и методы расчета оптических nanoструктур: Учебное пособие. - М.: РУДН, 2008. - 138 с.
28. A LAMMPS implementation of granular mechanics: Inclusion of adhesive and microscopic friction forces Christian Ringl, Herbert M. Urbassek Volume 183, Issue 4, April 2012, Pages 986-992
29. A LAMMPS implementation of volume-temperature replica exchange molecular dynamics Liang-Chun Liu, Jer-Lai Kuo, Volume 189, April 2015, Pages 119–127

Приложение 1. Охрана труда

Основные нагрузки при выполнении данной работы: интеллектуальные, эмоциональные, зрительные, и, в меньшей степени, слуховые. Вся работа проводилась за персональным компьютером и за письменным столом, натурные эксперименты отсутствовали. Организация работы должна проводиться в этом случае согласно СниП 2.2.2/2.41340-03. По природе действия вредные и опасные факторы подразделяются на следующие группы:

- физические факторы: температура, влажность и подвижность воздуха, неионизирующие электромагнитные излучения (ультрафиолетовое, видимое, инфракрасное, лазерное, микроволновое, радиочастотное, низкочастотное), статическое, электрические и магнитные поля, ионизирующие излучения, производственный шум, вибрация (локальная, общая), ультразвук, аэрозоли преимущественно фиброгенного действия (пыли), освещенность (отсутствие естественного освещения, недостаточная освещенность, повышенная ультрафиолетовая радиация);
- химические факторы, в том числе некоторые вещества биологической природы (антибиотики, витамины, гормоны, ферменты);
- биологические факторы: патогенные микроорганизмы, микроорганизмы продуценты, препараты, содержащие живые клетки и споры микроорганизмов, белковые препараты;
- факторы трудового процесса, характеризующие тяжесть физического труда: физическая динамическая нагрузка, масса поднимаемого и перемещаемого груза, стереотипные рабочие движения, статическая нагрузка, рабочая поза, наклоны корпуса, перемещение в пространстве;
- факторы трудового процесса, характеризующие напряженность труда: интеллектуальные, сенсорные, эмоциональные нагрузки, монотонность нагрузок, режим работы,

В помещении лаборатории или кафедры на сотрудника, работающего с вычислительной техникой, могут негативно действовать следующие факторы:

- повышенная и пониженная температура воздуха;
- чрезмерная запыленность и загазованность воздуха;
- повышенная и пониженная влажность воздуха;
- недостаточная освещенность рабочего места;

- превышающий допустимые нормы шум;
- повышенный уровень ионизирующего излучения;
- повышенный уровень электромагнитных полей;
- повышенный уровень статического электричества;
- опасность поражения электрическим током;
- блеклость экрана дисплея;
- длительное пребывание в сидячем положении;
- гиподинамия;
- повышенные интеллектуальные и психоэмоциональные нагрузки;
- ненормированный рабочий день,

Требования к вентиляции, отоплению и кондиционированию воздуха

Микроклимат производственных помещений — это климат внутренней среды этих помещений, который определяется действующими на организм человека сочетаниями температуры, влажности и скорости движения воздуха. Допустимые микроклиматические условия — это такие сочетания параметров микроклимата, которые при длительном и систематическом воздействии на человека могут вызвать напряжение реакций терморегуляции и которые не выходят за пределы физиологических приспособительных возможностей. При этом не возникает нарушений в состоянии здоровья, не наблюдаются дискомфортные теплоощущения, ухудшающие самочувствие и понижение работоспособности. Оптимальные параметры микроклимата в производственных помещениях обеспечиваются системами кондиционирования воздуха, а допустимые параметры — обычными системами вентиляции и отопления. Помещение кафедры является помещением категории 1а. Для создания и автоматического поддержания в лаборатории независимо от наружных условий оптимальных значений температуры, влажности, чистоты и скорости движения воздуха, в холодное время года используется водяное отопление, в теплое время года применяется кондиционирование воздуха. Кондиционер представляет собой вентиляционную установку, которая с помощью приборов автоматического регулирования поддерживает в помещении заданные параметры воздушной среды. Также одежда персонала должна соответствовать температурному режиму в по-

мешении. Отопление, вентиляция и кондиционирование должны осуществляться согласно СНиП 2.04.05-91:

1. В холодные периоды года температура воздуха, скорость его движения и относительная влажность воздуха должны составлять: 22 - 24°C; 0.1 м/с; 40-60%; температура воздуха может колебаться в пределах от 21 до 25°C.
2. То же в теплые периоды года: 23 — 25°C; 0.1-0.2 м/с; 40-60%; температура воздуха может колебаться в пределах от 22 до 26°C.
3. Воздух, поступающий в помещения с ЭВМ, должен быть отчищен от загрязнений, в том числе от пыли и микроорганизмов.

Требования к уровням шума

Шум — беспорядочное сочетание различных по силе и частоте звуков. Эквивалентный (по энергии) уровень звука (дБА) непостоянного шума - уровень звука постоянного широкополосного шума, который имеет такое же среднеквадратичное звуковое давление, что и данный непостоянный шум в течение определенного интервала времени. Предельно допустимый уровень (ПДУ) шума — это уровень фактора, который при ежедневной (кроме выходных дней) работе, но не более 40 часов в неделю в течение всего рабочего стажа, не должен вызывать заболеваний или отклонений в состоянии здоровья, обнаруживаемых современными методами исследований в процессе работы или в отдаленные сроки жизни настоящего и последующих поколений. Соблюдение ПДУ шума не исключает нарушения здоровья у сверхчувствительных лиц. В нашем помещении источником шумовых помех могут стать вентиляционные установки, кондиционеры и др. Длительное воздействие этих шумов отрицательно сказываются на эмоциональном состоянии персонала. Шум ухудшает условия труда оказывая вредное действие на организм человека. Работающие в условиях длительного шумового воздействия испытывают раздражительность, головные боли, головокружение, снижение памяти, повышенную утомляемость, понижение аппетита, боли в ушах и т. д. Такие нарушения в работе ряда органов и систем организма человека могут вызвать негативные изменения в эмоциональном состоянии человека вплоть до стрессовых. Под воздействием шума снижается концентрация внимания, нарушаются физиологические функции, появляется усталость

в связи с повышенными энергетическими затратами и нервно-психическим напряжением, ухудшается речевая коммутация. Все это снижает работоспособность человека и его производительность, качество и безопасность труда. Длительное воздействие интенсивного шума (выше 80 дБА) на слух человека приводит к его частичной или полной потере. Для того, чтобы добиться допустимого уровня шума рекомендуется применять звукопоглощающее покрытие стен.

Требования к естественному и искусственному освещению для помещений вычислительных комнат

Освещённость — плотность светового потока по поверхности, на которую он падает. Правильно спроектированное и выполненное производственное освещение улучшает условия зрительной работы, снижает утомляемость, способствует повышению производительности труда, благотворно влияет на производственную среду, оказывая положительное психологическое воздействие на работающего, повышает безопасность труда и снижает травматизм. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Существует три вида освещения: естественное, искусственное и совмещенное (естественное и искусственное вместе). Естественное освещение — освещение помещений дневным светом, проникающим через световые проемы в наружных ограждающих конструкциях помещений. Естественное освещение характеризуется тем, что меняется в широких пределах в зависимости от времени дня, времени года, характера области и ряда других факторов. Искусственное освещение применяется при работе в темное время суток и днем, когда не удается обеспечить нормированные значения коэффициента естественного освещения (пасмурная погода, короткий световой день). Освещение, при котором недостаточное по нормам естественное освещение дополняется искусственным, называется совмещенным освещением. Искусственное освещение подразделяется на рабочее, аварийное, эвакуационное, охранное. Рабочее освещение, в свою очередь, может быть общим или комбинированным, Общее — освещение, при котором светильники размещаются в верхней зоне помещения равномерно или применительно к расположению оборудования.

Комбинированное — освещение, при котором к общему добавляется местное освещение, Работа, выполняемая с использованием вычислительной техники, имеют следующие недостатки: вероятность появления прямой блесткости, ухудшенная контрастность между изображением и фоном, отражение экрана. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Освещение в помещениях, где располагается вычислительная техника, должно быть смешанным: естественным и искусственным. При выполнении зрительной работы категории средней точности к. е. о. должен быть не ниже 4 %. Искусственное освещение в помещениях следует осуществлять в виде комбинированной системы освещения с использованием люминесцентных источников света в светильниках общего назначения. В качестве источников должны использоваться люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ с индексом цветопередачи ($R > 70$), В качестве светильников должны использоваться установки с преимущественно отраженным или рассеянным светораспределением (тип УСП-5-2x40, УСП-35-2x40, ЛВ003-2x40-002). Величина освещенности при искусственном освещении люминесцентными лампами должна быть в горизонтальной плоскости не ниже 300лк — для системы общего освещения и не ниже 750лк — для системы комбинированного освещения, причем с учетом работы категории высокой зрительной точности может быть увеличена до 1000лк. Для исключения бликов отражения на экранах от светильников общего назначения необходимо применять антибликерные сетки, специальные фильтры для экранов, защитные козырьки и т.п.

Пожарная безопасность при работе с вычислительной техникой

Пожарная безопасность — это состояние защищенности личности, имущества, общества и государства от пожаров. Пожар — это неконтролируемое горение, причиняющее материальный ущерб, вред жизни и здоровью граждан, интересам общества и государства. Определение категорий помещений осуществляется на стадии проектирования путем последовательной проверки принадлежности к категориям, установленным нормативными документами.

Причинами взрывов и пожаров часто являются электрооборудование и электрические сети. Опасность загорания в ЭВМ связана со значительным количеством плотно расположенных на монтажных платах и блоках: электронных узлов и схем, электрических и коммутационных кабелей, резисторов, конденсаторов, полупроводниковых диодов и транзисторов. Высокая плотность элементов в электронных схемах приводит к значительному повышению температуры отдельных узлов (80 — 200°C), что может служить причиной воспламенения изоляционных материалов. В связи с этим в помещениях вычислительного центра должны быть предусмотрены возможные пути эвакуации персонала. Требования к количеству, размерам и размещению эвакуационных выходов, лестниц и лестничных клеток, а именно:

1. Эвакуационные выходы должны располагаться рассредоточено. Минимальное расстояние l между наиболее удаленными один от другого эвакуационными выходами из помещения следует определять по формуле: $l = \sqrt{\Pi}$, где Π — периметр помещения,
4. Ширина путей эвакуации в свету должна быть не менее 1м, дверей- не менее 0.8м.
5. Высота прохода на путях эвакуации должна быть не менее 2м.
6. Не допускается устройство винтовых лестниц, забежных ступеней, раздвижных и подъемных дверей и ворот, а также вращающихся дверей и турникетов.
7. Двери на путях эвакуации должны открываться по направлению выхода из здания.
8. Наружные эвакуационные двери зданий не должны иметь запоров, которые не могут быть открыты изнутри без ключа.

Требования электробезопасности

Для питания ЭВМ служит трехфазная электросеть с напряжением 380/220В и частотой 50Гц. Помещение, в котором располагался вычислительный центр, относится к помещениям без повышенной опасности (ГОСТ 12.1.013), поэтому защитное заземление не применялось (ГОСТ 12.1.030). При этом обслуживающий персонал

должен допускаться до работы только после инструкции по технике безопасности. Изолирующие корпуса терминалов обеспечивают недоступность токоведущих частей, находящихся под напряжением.

Эргономические требования

Настоящий стандарт ГОСТ Р ИСО 9241-5-2009 устанавливает руководящие принципы, применяемые при формировании требований пользователей, а также при разработке проекта и установке оборудования рабочих станций, предназначенных для проведения офисных работ с применением видеодисплейных терминалов. Общие принципы и требования, установленные в настоящем стандарте, следует учитывать при разработке стандартов, устанавливающих требования к конструкции офисной мебели и оборудования рабочего места оператора. Под рабочим местом понимается зона, оснащенная необходимыми техническими средствами, в которой совершается трудовая деятельность исполнителя или группы исполнителей, совместно выполняющих одну работу или операцию. Конструкция рабочего места должна обеспечивать быстроту, безопасность, простоту и экономичность технического обслуживания в нормальных и аварийных условиях; полностью отвечать функциональным требованиям и предполагаемым условиям эксплуатации. Конструкция рабочего стола должна обеспечивать оптимальное размещение на рабочей поверхности используемого оборудования с учетом его количества и конструктивных особенностей, характера выполняемой работы. Высота рабочей поверхности стола для взрослых пользователей должна регулироваться в пределах 680-800 мм; при отсутствии такой возможности высота рабочей поверхности стола должна составлять 725 мм. Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы, позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления. Тип рабочего стула (кресла) должен выбираться в зависимости от характера и продолжительности работы с учетом роста пользователя. Поверхность сиденья, спинки и других элементов стула (кресла) должна быть полумягкой, с нескользящим, неэлектризующимся и воздухонепроницаемым покрытием, обеспечивающим легкую очистку от загрязнений. Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от

края, обращенного к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы,

Напряженность трудового процесса

Тяжесть трудового процесса в ходе работы над диссертацией можно отнести к оптимальному классу условий труда (легкая физическая нагрузка), основная нагрузка интеллектуальная, присутствует возможность гибкого графика работы, изменения рабочей позы. Классифицировать по степени напряженности выполняемую работу можно следующим образом: интеллектуальные нагрузки предполагают решение сложных задач с выбором по известным алгоритмам (напряженный труд 1-ой степени); а также эвристическую, творческую деятельность, требующую решения сложных задач при отсутствии алгоритма (напряженный труд 2-ой степени); большую часть времени работа проходит установленному графику с возможной его коррекцией по ходу деятельности (напряженный труд 1-ой степени); часто присутствует работа в условиях дефицита времени (напряженный труд 2-ой степени); сенсорные нагрузки (работа за экраном компьютера) присутствуют более четырех часов за рабочий день (напряженный труд 2-ой степени); фактическая продолжительность рабочего дня 8-9 часов (напряженность труда средней степени).