

УДК 539.3

РАВНОВЕСИЕ И УСТОЙЧИВОСТЬ ГПУ-СТРУКТУР ПРИ КОНЕЧНЫХ ДЕФОРМАЦИЯХ

© 2014 г. Е. А. Подольская

Представлено академиком Н.Ф. Морозовым 17.02.2014 г.

Поступило 25.02.2014 г.

DOI: 10.7868/S086956521423011X

Для обеспечения работоспособности материала и прогнозирования возникновения предельных состояний требуется построение моделей разрушения на разных масштабных уровнях с учетом внутренней структуры материала [1, 2]. При этом и с научной, и с практической точки зрения особое значение приобретает изучение поведения материалов с идеальной геометрической структурой. Это объясняется тем, что кристаллическая структура характерна для металлов, которые широко используются в технике. Кроме того, в связи с развитием нанотехнологий все большее применение находят монокристаллы, прочность которых близка к теоретической, или идеальной. Ввиду того, что одной из возможных причин разрушения материала является потеря устойчивости его внутренней структуры, при экспериментальном измерении идеальной прочности необходимо проверять устойчивость материала относительно любого дополнительного малого искажения для каждого приращения напряжения или деформации [2].

Для исследования устойчивости внутренней структуры кристаллов в данной работе применяется дискретно-континуальный подход. Используется метод длинных волн, позволяющий перейти от дискретной системы к эквивалентному континууму, свойства которого далее исследуются методами механики сплошной среды. При этом переходе используется правило Коши–Борна [3], заключающееся в том, что при наложении деформации на материальный объем изменение положения каждой частицы будет описываться одним и тем же деформационным градиентом, если решетка простая (т.е. совпадает со своей решеткой Браве). Дальнейшее исследование для простых решеток приведено, например, в [7, 8]. Для сложных решеток из-за наличия внутренних степеней

свободы это правило должно быть изменено. Один из вариантов, используемый в данной работе, представлен в [5]. Обзор, посвященный модификациям правила Коши–Борна, приведен в [6].

Для описания материала в отсчетной конфигурации введем систему координат и положение каждой частицы свяжем с началом отсчета. Следуя [4], произвольной частице присвоим номер 0, остальным – номера $k = 1, 2, \dots, N$. Для двухатомных решеток, к которым относится ГПУ-структура, связь между длинами и векторами связей в отсчетной и актуальной конфигурациях дается формулой [5]:

$$a_k \mathbf{e}_k = a_k^0 \mathbf{e}_k^0 \cdot \mathring{\nabla} \mathbf{r} + v_k \boldsymbol{\xi}, \quad (1)$$

где a_k и \mathbf{e}_k – длина связи и орт направления связи в актуальной конфигурации, a_k^0 и \mathbf{e}_k^0 – длина связи и орт направления связи в отсчетной конфигурации, $\mathbf{r} \mathring{\nabla} = (\mathring{\nabla} \mathbf{r})^T$ – деформационный градиент [9], $v_k = 0$, если взаимодействуют частицы из одной подрешетки, $v_k = 1$, если частицы из разных подрешеток, $\boldsymbol{\xi}$ – вектор сдвига подрешеток.

В данной работе ограничимся гипотезой парного силового взаимодействия. Потенциальная энергия деформации (энергия Коши–Борна) для рассматриваемой модели материала определяется формулой [4, 10]:

$$W = \frac{1}{2V_0} \sum_k \Pi_k, \quad \Pi_k = \Pi(a_k), \quad (2)$$

где V_0 – объем элементарной ячейки в отсчетной конфигурации, $\Pi = \Pi(r)$ – парный силовой потенциал, зависящий только от расстояния между частицами.

Уравнения равновесия эквивалентной сплошной среды в отсчетной конфигурации имеют вид

Институт проблем машиноведения
Российской Академии наук, Санкт-Петербург
Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет

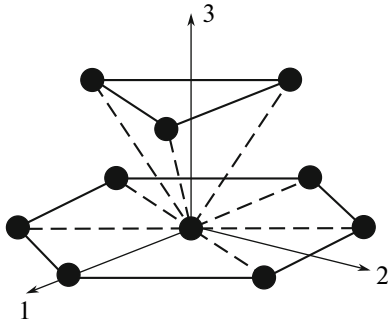


Рис. 1. Характерная часть ГПУ- и ГЦК-структур и главные направления деформационного градиента.

$$\frac{\partial W}{\partial(\mathring{\nabla}\mathbf{r})} = 0 \Rightarrow \sum_k \Pi'(a_k^0) a_k^0 \mathbf{e}_k^0 \mathbf{e}_k^0 = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial W}{\partial \xi} = 0 \Rightarrow \sum_k v_k \Pi'(a_k^0) \mathbf{e}_k^0 = 0.$$

Обычно второе уравнение выполняется тождественно, а первое используется для определения “поджатия связей” [4]: при учете более одной координационной сферы равновесное расстояние между ближайшими соседями меньше, чем равновесное расстояние потенциала.

После наложения однородной деформации второе уравнение будет определять сдвиг подрешеток:

$$\frac{\partial W}{\partial \xi} = 0 \Rightarrow \sum_k v_k \Pi'_k \mathbf{e}_k = 0, \quad \Pi'_k = \Pi'(a_k). \quad (4)$$

Поскольку деформация самих подрешеток однородная, то дополнительное уравнение равновесия не требуется.

В качестве критерия устойчивости (5) рассмотрим положительность второй вариации потенциальной энергии деформации [11]. Можно показать, что для простой решетки она равносильна выполнению условия сильной эллиптичности уравнений равновесия – необходимого условия устойчивости однородно-деформированного материала [9]. Кроме того, для простой решетки в рассматриваемой постановке условие сильной эллиптичности является также и достаточным [7, 8].

$$\delta^2 W > 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \delta(\mathbf{r}\mathring{\nabla}) \cdot {}^4\mathbf{Q}_* \cdot \delta(\mathbf{r}\mathring{\nabla}) > 0, \\ \delta\xi_* \cdot {}^2\mathbf{Q} \cdot \delta\xi_* > 0, \end{cases} \quad (5)$$

$$\forall \delta\xi_*, \quad \forall \delta(\mathbf{r}\mathring{\nabla}),$$

где

$${}^4\mathbf{Q}_* = {}^4\mathbf{Q} - {}^3\mathbf{Q}^T \cdot {}^2\mathbf{Q}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{Q},$$

$$\delta\xi_* = \delta\xi - {}^2\mathbf{Q}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{Q} \cdot \delta(\mathbf{r}\mathring{\nabla}),$$

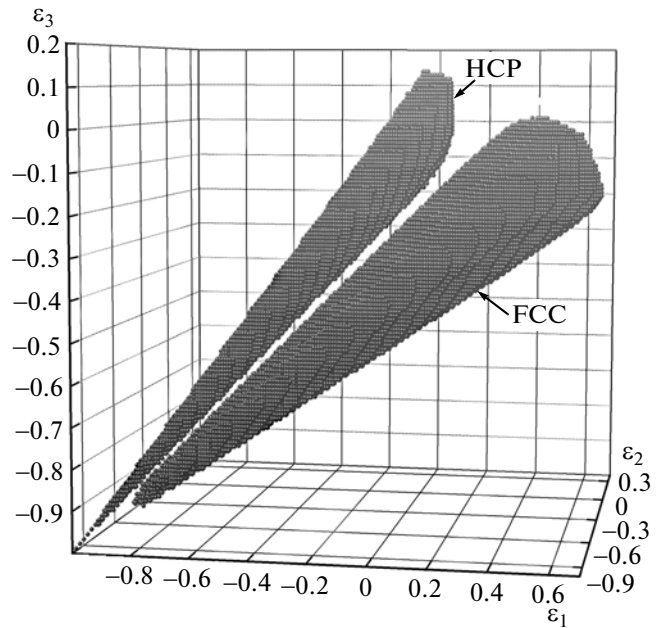


Рис. 2. Области устойчивости ГПУ-структуры, потенциал Леннарда-Джонса. Левая область отвечает ненапряженной ГПУ-структуре (HCP), правая – ненапряженной ГЦК-структуре (FCC).

$${}^4\mathbf{Q} = \frac{\partial^2 W}{\partial(\mathring{\nabla}\mathbf{r})^2} = \frac{1}{2V_0} \sum_k \left[\frac{1}{a_k^2} \left(\Pi_k'' - \frac{\Pi_k'}{a_k} \right) \mathbf{a}_k^0 \mathbf{a}_k^0 \mathbf{a}_k^0 \mathbf{a}_k^0 + \sum_n \frac{\Pi_k'}{a_k} \mathbf{a}_k^0 \mathbf{i}_n \mathbf{a}_k^0 \mathbf{i}_n \right], \quad (6)$$

$${}^3\mathbf{Q} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial W}{\partial(\mathring{\nabla}\mathbf{r})} \right) = \frac{1}{2V_0} \sum_k \left[v_k \left(\Pi_k'' - \frac{\Pi_k'}{a_k} \right) \mathbf{a}_k^0 \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + v_k \frac{\Pi_k'}{a_k} \mathbf{a}_k^0 \mathbf{E} \right],$$

$${}^2\mathbf{Q} = \frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} = \frac{1}{2V_0} \sum_k \left[v_k \Pi_k'' \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + v_k \frac{\Pi_k'}{a_k} (\mathbf{E} - \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k) \right];$$

здесь $\mathbf{E} = \sum_n \mathbf{i}_n \mathbf{i}_n$ – единичный тензор, \mathbf{i}_n – базисные векторы, $n = 1, 2, 3$ – размерность пространства.

Компоненты вектора сдвига подрешеток ξ , входящие в условие (5), определяются из (4) для каждого деформированного состояния. Из соображений симметрии ГПУ-структуры следует, что если одна из главных осей деформационного градиента $\mathbf{r}\mathring{\nabla}$ есть ось трансверсальной изотропии, а две другие лежат в плоскости изотропии, то ξ также лежит в плоскости изотропии. Ограничимся далее для наглядности только таким $\mathbf{r}\mathring{\nabla}$, главные

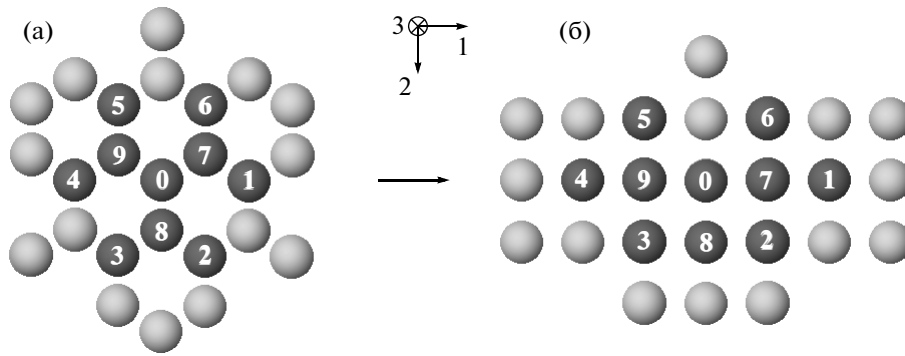


Рис. 3. Пример перехода из ГПУ- (а) в ГЦК-структуру (б).

оси которого представлены на рис. 1. В качестве примера закона взаимодействия будем использовать потенциал Леннард-Джонса

$$\Pi_{LJ}(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (7)$$

где D – глубина потенциальной ямы, a – равновесное расстояние.

На рис. 2 приведена область устойчивости ГПУ-структуры, ε_1 и ε_2 описывают деформацию в плоскости изотропии, ε_3 – вдоль оси трансверсальной изотропии ($1 + \varepsilon_1$, $1 + \varepsilon_2$, $1 + \varepsilon_3$ – главные значения деформационного градиента). Область устойчивости двухсвязная: одна часть, вытянутая вдоль линии $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$, содержит в себе ненапряженную ГПУ-структуру с координатами $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 0$, вторая – ненапряженную ГЦК-структуру с координатами

$$\varepsilon_1 = \sqrt{2} - 1, \quad \varepsilon_2 = \sqrt{\frac{2}{3}} - 1, \quad \varepsilon_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} - 1$$

при векторе сдвига

$$\xi_1 = 0, \quad \xi_2 = a \frac{\sqrt{2}}{6}, \quad \xi_3 = 0,$$

обеспечивающем выполнение условия равновесия (4). Как и для треугольной решетки [7], двухсвязность области устойчивости не зависит от конкретного вида потенциала взаимодействия (Леннард-Джонса, Морзе, Ми).

Непрерывный путь перехода из кубической в гексагональную решетку впервые описан в работе [12]. В дальнейшем были предложены другие переходы, например, в [13]. Методика, применяемая в данной работе, позволяет описать все возможные пути перехода. На рис. 3 показаны ненапряженные ГПУ- и ГЦК-структуры, присутствующие на рис. 2, в проекции на плоскость 1–2. Выделены нулевая частица и ее 12 ближайших соседей в ГПУ-структуре.

Полученные условия устойчивости справедливы в пространстве любой размерности для любой сложной двухатомной решетки при парном сило-

вом взаимодействии и могут быть распространены на случай многоатомных решеток, а также на случай более сложных законов взаимодействия. Данная методика позволяет получить область устойчивости материала с микроструктурой в пространстве конечных деформаций. Показана возможность описания различных путей структурного перехода на примере анализа двух несвязанных областей устойчивости, одна из которых содержит ненапряженную ГПУ-структуру, другая – ненапряженную ГЦК-структуру.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф. // Физ. мезомеханика. 2012. Т. 12. №. 2. С. 5–13.
2. Макмиллан Н. Идеальная прочность твердых тел. Атомистика разрушения. Сер.: Новое в зарубежной науке. Механика. М.: Мир, 1987. В. 40. С. 35–103.
3. Born M., Huang K. Dynamical Theory of Crystal Lattices. Oxford: Clarendon, 1954. 420 p.
4. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
5. Кривцов А.М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пособие. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. 126 с.
6. Ericksen J.L. // Math. and Mech. Solids. 2008. V. 13. № 3/4. P. 199–220.
7. Подольская Е.А., Кривцов А.М., Панченко А.Ю., Ткачев П.В. // ДАН. 2012. Т. 442. №. 6. С. 755–758.
8. Подольская Е.А., Кривцов А.М., Панченко А.Ю. // Вестн. СПбГУ. Сер. 1. Математика. Механика. Астрономия. 2012. №. 3. С. 123–128.
9. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
10. E W., Ming P. // Arch. Ration. Mech. and Anal. 2007. V. 183. №. 2. P. 241–297.
11. Fu Y.B., Ogden R.W. // Continuum Mech. and Thermodyn. 1999. V. 11. №. 3. P. 141–172.
12. Burgers W.G. // Physica. 1934. V. 1. № 7. P. 561–586.
13. Folkins I., Walker M.B. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. P. 127–130.