

УДК 539.3

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ СДВИГА НА ТЕОРЕТИЧЕСКУЮ ПРОЧНОСТЬ АТОМНОЙ РЕШЕТКИ

Н. С. Астапов, В. М. Корнев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Рассмотрена четырехатомная элементарная ячейка, соответствующая плотноупакованному слою атомов. Показано, что при возникновении сдвига система преждевременно теряет устойчивость. Сделан вывод, что в интегральных критериях хрупкой прочности типа Новожилова целесообразно принимать во внимание сдвиговые деформации.

В модифицированных дискретных критериях хрупкой прочности Новожилова [1] используется теоретическая прочность кристаллического тела, которая обычно оценивается без учета сдвиговых деформаций. Возникновение сдвиговых деформаций при растяжении идеального кристалла вдоль оси симметрии атомной решетки приводит к преждевременному сдвиговому разрушению [2, 3]. Для проведения статического анализа устойчивости идеального кристалла в [4] применяется ньютоновское приближение, причем для описания взаимодействия атомов используются полуэмпирические потенциалы типа потенциалов Леннарда-Джонса и Борна — Майера. В этом случае для изучения влияния внешних консервативных сил на механическое поведение кристалла в качестве функции полной потенциальной энергии системы выбирается сумма потенциала сил и эффективной энергии межатомных взаимодействий. В [3] отмечается, что такой подход часто дает необходимую информацию для описания макроскопических механических свойств твердого тела.

В настоящей работе рассматривается четырехатомная элементарная ячейка, соответствующая плотноупакованному слою атомов. В рамках подхода, изложенного в [3, 5], изучается влияние сдвиговых деформаций на устойчивость растягиваемой вдоль диагонали ромбовидной четырехатомной ячейки при однородном деформировании. Для учета межатомного взаимодействия выбран потенциал Морса [6, 7]. Хотя межатомные силы почти для всех металлов даже приблизительно не являются центральными, основная часть изменения энергии с изменением атомной конфигурации при постоянном атомном объеме может быть описана через центральное взаимодействие [6–8]. Поэтому, если даже нецентральные взаимодействия дают существенный вклад в энергию атомной решетки, все же можно получить удовлетворительные оценки некоторых свойств с помощью простейшей модели парных центральных взаимодействий [1, 7, 9].

Изучаемая система обладает неустойчивым закритическим поведением. Установлено, что при возникновении сдвига система преждевременно теряет устойчивость, а критическая точка на кривой деформирования определяется параметрами потенциальной функции Морса. Поэтому целесообразно в интегральных критериях хрупкой прочности типа Новожилова использовать уточненную оценку теоретической прочности кристаллических тел, принимая во внимание сдвиговые деформации.

Постановка задачи. Примем, что потенциальная энергия взаимодействия между любыми двумя атомами есть некоторая функция $w(s)$ — сферически симметричный потен-

циал взаимодействия двух тел, для которого сила взаимодействия направлена по прямой, соединяющей их центры (s — расстояние между центрами). В дальнейшем ограничимся рассмотрением взаимодействия только ближайших соседей, поскольку нельзя утверждать [6, с. 138], что потенциал Морса адекватно описывает поле атома на расстояниях, превышающих несколько расстояний между ближайшими соседними атомами. При этом считается, что в кристалле могут реализоваться только плоские кинематически допустимые поля перемещений с однородными деформациями и только двумя степенями свободы. Исследуем устойчивость при растяжении плоской четырехатомной ячейки, соответствующей плотноупакованному слою атомов. В частности, рассмотрим случай растяжения в направлении, перпендикулярном плотной упаковке, когда приложенное к слою напряжение стремится раздвинуть плотноупакованные цепочки атомов, при этом, возможно, вращая их, но не меняя длины цепочки.

Поскольку для ненагруженного кристалла суммарная сила, действующая на каждый атом, равна нулю, кристалл можно рассматривать как плотноупакованную решетку сфер диаметром g , где $\left. \frac{dw}{ds} \right|_{s=g} = 0$. В качестве $w(s)$ возьмем потенциал Морса [1, 6, 7]

$$w(s) = D[\exp(-2a(s-g)) - 2\exp(-a(s-g))].$$

Полагая $\gamma = s/g$ (γ — безразмерное смещение), $b = ag$, $2D = Ag^{-6}$, получим

$$v(\gamma) = w(\gamma g) = Ag^{-6} \left[\frac{1}{2} \exp(-2b(\gamma-1)) - \exp(-b(\gamma-1)) \right]. \quad (1)$$

Здесь D , a , g , следовательно, и A , b — параметры, определяемые типом атомов. Сила взаимодействия T пары атомов дается равенством

$$T = \frac{dw}{ds} = -Abg^{-7} [\exp(-2b(\gamma-1)) - \exp(-b(\gamma-1))], \quad (2)$$

при $\gamma = \gamma_* = 1 + \ln 2/b$ она достигает максимума $T_2 = Ab/(4g^7)$ или, в безразмерном виде,

$$T_* = \frac{T_2 g^7}{Ab} = \frac{1}{4}. \quad (3)$$

При выполнении некоторых предположений [3] общая потенциальная энергия бесконечного плоского слоя пропорциональна энергии $V(\theta, \rho)$ элементарной ячейки, состоящей из четырех атомов. На рис. 1, а представлена недеформированная ячейка, на рис. 1, б (заимствованном из [3, рис. 69]) — ромбовидная ячейка, растянутая вдоль диагонали.

Независимые обобщенные координаты θ и ρ позволяют определить деформацию элементарной ячейки, причем $\theta = 0$ для идеальной системы (без учета сдвига). Введем две зависимые переменные α и β (рис. 1, б):

$$\alpha^2 = 1/4 + \rho^2 - \rho \sin \theta, \quad \beta^2 = 1/4 + \rho^2 + \rho \sin \theta. \quad (4)$$

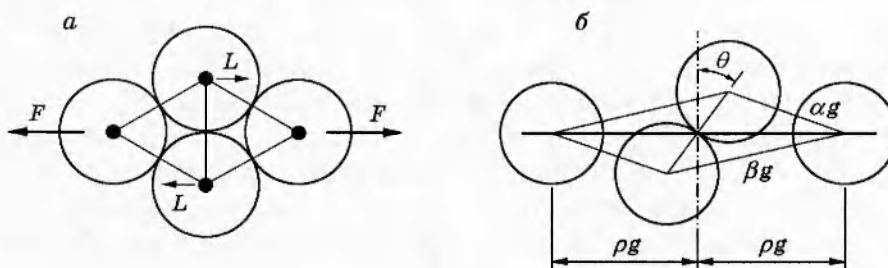


Рис. 1

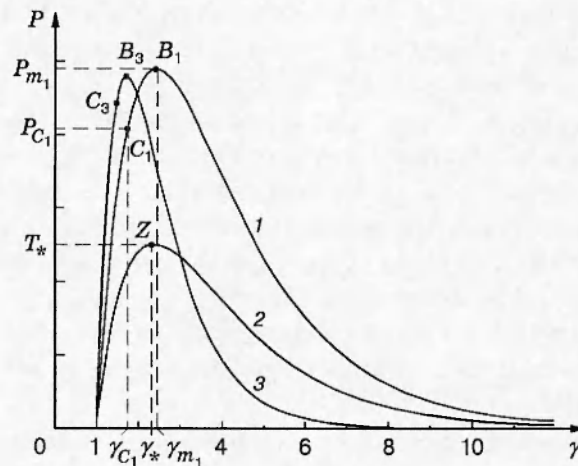


Рис. 2

Рассмотрим деформацию системы под действием сил F и L (рис. 1, *a*). Функцию общей потенциальной энергии элементарной ячейки можно записать в виде [3]

$$V(\theta, \rho, F, M) = 2v(\alpha(\theta, \rho)) + 2v(\beta(\theta, \rho)) - 2F\rho g - M\theta,$$

где $M = Lg$ — момент силы L . Частные производные первого порядка по θ и ρ функции V равны $V_\theta = 2v_\alpha\alpha_\theta + 2v_\beta\beta_\theta - M$, $V_\rho = 2v_\alpha\alpha_\rho + 2v_\beta\beta_\rho - 2Fg$. Здесь v_α и v_β — производные функции (1) по γ

$$v_\gamma = -Abg^{-6}[\exp(-2b(\gamma - 1)) - \exp(-b(\gamma - 1))]. \quad (5)$$

Частные производные функций $\alpha(\theta, \rho)$ и $\beta(\theta, \rho)$ находятся из соотношений (4) как производные неявных функций. Для идеальной системы в отсутствие сдвига имеем $M = 0$, тогда из уравнений равновесия $V_\theta = 0$, $V_\rho = 0$ можно найти основное решение с $\theta = 0$. Оно определяется из уравнения

$$2v_\gamma\gamma_\rho = Fg, \quad (6)$$

где γ заменяется либо на α , либо на β . Заметим, что при $\theta = 0$ имеем $\alpha = \beta$, $\alpha_\rho = \beta_\rho$ и

$$\alpha\alpha_\rho = \beta\beta_\rho = \rho = \sqrt{\gamma^2 - 1/4}.$$

Обсуждение результатов. Используя (5) и (6), для зависимости силы P от деформации γ четырехатомной ячейки окончательно получим соотношение

$$P = P(\gamma) = \frac{Fg^7}{Ab} = \frac{2v_\gamma\gamma_\rho g^6}{Ab} = \sqrt{4\gamma^2 - 1}[\exp(-b(\gamma - 1)) - \exp(-2b(\gamma - 1))]/\gamma. \quad (7)$$

Зависимость силы от деформации показана на рис. 2. Кривые 1 и 3 соответствуют четырехатомной ячейке при $b = 0,5$; 1 (см. соотношение (7)), кривая 2 — паре атомов при $b = 0,5$ (см. соотношение (2)). Экстремумы на кривых 1 и 3 отмечены точками B_1 и B_3 , которым соответствуют значения параметров деформации γ_{m_1} и γ_{m_3} и сил P_{m_1} и P_{m_3} ; точкам C_1 и C_3 отвечают критические значения параметров деформации γ_{c_1} и γ_{c_3} и критических сил P_{c_1} и P_{c_3} , при которых система теряет устойчивость от сдвига. Точке максимума Z на кривой 2 соответствуют критическое значение параметра деформации γ_* и сила $T_* = 1/4$ (см. соотношение (3)). Для каждого значения b на основной траектории равновесия в силу симметрии системы производная $V_{\theta\rho}$ равна нулю, поэтому устойчивость траектории равновесия определяется двумя коэффициентами устойчивости $V_{\theta\theta}$ и $V_{\rho\rho}$ [3].

Обращение в нуль коэффициента $V_{\rho\rho}$ соответствует максимальной точке $B(\gamma_m, P_m)$ траектории равновесия (точки B_1 и B_2 на рис. 2). Поскольку на основной траектории равновесия $\theta = 0$ и поэтому $\alpha_{\rho\rho} = \beta_{\rho\rho}$, из условия $V_{\rho\rho} = 0$ следует равенство

$$V_{\rho\rho} = 4(v_{\gamma\gamma}\gamma^2 + v_{\gamma\rho\rho}) = 4\{Ab^2g^{-6}[2\exp(-2b(\gamma-1)) - \exp(-b(\gamma-1))](\rho/\gamma)^2 - Abg^{-6}[\exp(-2b(\gamma-1)) - \exp(-b(\gamma-1))](\gamma^2 - \rho^2)/\gamma^2\} = 0.$$

Отсюда, так как $\gamma^2 = 1/4 + \rho^2$ при $\theta = 0$, для определения координаты $\gamma = \gamma_m$ точки максимума $B(\gamma_m, P_m)$ траектории равновесия получим уравнение

$$\exp(-b(\gamma_m - 1)) = \frac{b\gamma_m(4\gamma_m^2 - 1) - 1}{2b\gamma_m(4\gamma_m^2 - 1) - 1}. \quad (8)$$

Отметим, что координату $\gamma = \gamma_m$ критической точки $B(\gamma_m, P_m)$ можно найти, пользуясь выражением (7), и из условия равенства нулю производной по γ функции $P(\gamma)$. Точка $C(\gamma_C, P_C)$, в которой обращается в нуль коэффициент $V_{\theta\theta}$, является точкой бифуркации (точки C_1 и C_3 на рис. 2), в ней могут начать развиваться деформации сдвига с ненулевыми значениями θ . Этой второй критической точке соответствует безразмерное смещение γ_C , величина которого зависит от параметров потенциальной функции. Полагая $V_{\theta\theta} = 0$, находим соответствующее критическое значение $\gamma = \gamma_C$ из уравнения $v_{\gamma\gamma} - v_{\gamma}/\gamma = 0$ или после очевидных преобразований из уравнения

$$\exp(-b(\gamma_C - 1)) = \frac{b\gamma_C + 1}{2b\gamma_C + 1}, \quad (9)$$

которое зависит от параметра b , характеризующего тип атома.

Покажем, что точка бифуркации C , отвечающая возникновению деформаций сдвига, появляется прежде, чем основная траектория равновесия достигнет максимальной точки B . Для этого сначала докажем, что при любом $b > 0$ значение γ_C , определяемое из уравнения (9), меньше $\gamma_* = 1 + \ln 2/b$, при котором достигает максимума сила взаимодействия $T(\gamma)$ двух атомов. На рис. 2 для $b = 0,5$ приведен график (кривая 2) функции $T(\gamma)g^7/(Ab)$, на котором точка максимума $Z(\gamma_*, T_*) = Z(\gamma_*, 1/4)$ отмечена в согласии с равенством (3). Заметим, что функция $f(\gamma) = \exp(-b(\gamma-1))$ при $b > 0$ является убывающей. Так как для $\gamma_C > 0$ справедливо неравенство

$$\exp(-b(\gamma_C - 1)) = \frac{b\gamma_C + 1}{2b\gamma_C + 1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2(2b\gamma_C + 1)} > \frac{1}{2} = \exp(-b(\gamma_* - 1)),$$

то получаем $\gamma_C < \gamma_*$. Теперь покажем, что для $b > 1/6$ справедливо неравенство $\gamma_* < \gamma_m$. Так как из физических соображений имеем $\gamma \geq 1$, то $2b\gamma(4\gamma^2 - 1) - 1 > 0$ при $b > 1/6$. Поэтому, пользуясь (8), имеем

$$\exp(-b(\gamma_m - 1)) = \frac{b\gamma_m(4\gamma_m^2 - 1) - 1}{2b\gamma_m(4\gamma_m^2 - 1) - 1} = \frac{1}{2} - \frac{b\gamma_m(4\gamma_m^2 - 1)}{2(2b\gamma_m(4\gamma_m^2 - 1) - 1)} < \frac{1}{2} = \exp(-b(\gamma_* - 1))$$

и, учитывая убывание функции $f(\gamma) = \exp(-b(\gamma-1))$ при $b > 0$, получаем $\gamma_* < \gamma_m$. Таким образом, для $b > 1/6$ аналитически доказана цепочка неравенств $\gamma_C < \gamma_* < \gamma_m$, т. е. показано, что при возникновении сдвига система преждевременно теряет устойчивость, причем соответствующая критическая точка $\gamma = \gamma_C$ на кривой деформирования определяется параметрами выбранной потенциальной функции. Так, если выбран потенциал Морса, то γ_m и γ_C определяются соответственно из соотношений (8) и (9) и зависят от параметра b , характеризующего тип атома. Однако для потенциала Леннарда-Джонса имеем $\gamma_C = (7/4)^{1/6} < (13/7)^{1/6} = \gamma_m$ независимо от типа атома, составляющего решетку

b	γ_m	γ_*	γ_C	P_m	P_C	$\Delta P/P_m, \%$
0,5	2,424	2,386	1,770	0,489	0,417	14,7
1	1,721	1,693	1,467	0,478	0,440	7,9
2,076	1,348	1,334	1,262	0,464	0,447	3,7
4	1,179	1,173	1,150	0,453	0,446	1,5
6	1,119	1,116	1,104	0,447	0,443	0,9
8,46	1,084	1,082	1,076	0,444	0,442	0,4

[3, с. 120]. Заметим, что в этом случае величина $((P_m - P_C)/P_m) \cdot 100\% \approx 0,73\%$ оказывается постоянной, не зависящей от типа атома и может быть существенно меньшей, чем для потенциала Морса, например, при $b < 4$.

В таблице для $A = 1$, $g = 1$ и различных b ($0,5 \leq b \leq 8,46$) даны значения γ_m , γ_C и соответствующие им значения нагрузок P_m , P_C , вычисленные по формуле (7). Здесь же приведены значения $\gamma_* = 1 + \ln 2/b$, однако соответствующее им согласно (3) для любого b значение $T_* = 1/4$ опущено. Заметим, что для любого b данные таблицы удовлетворяют неравенству $P_m < 2P_*$, что легко объясняется физическим смыслом исходной модели. Значения параметра b заимствованы из различных работ по физике твердого тела (см. [9] и библиографию к ней). В работе [9] эти данные использовались для анализа влияния примесных атомов на снижение прочности растянутых атомных цепочек. В последней графе дано относительное отклонение нагрузки P_C от P_m в процентах: $((P_m - P_C)/P_m) \cdot 100\%$. Приведенные в таблице данные показывают, что при $b \approx 2$ сила P_C имеет экстремум: в этом случае четырехатомная ячейка оказывается наиболее устойчивой по отношению к сдвигу, когда межатомное взаимодействие описывается потенциалом Морса.

Выводы. Нагрузка P_C , при которой возникают деформации сдвига, может оказаться на 7,9% меньше нагрузки P_m , при которой начинает разрушаться идеальная система: эти нагрузки P_C и P_m соответствуют физическому параметру $b = 1$. Подчеркнем, что для неидеальной системы эта разность может превышать 25–30% (см. [3, рис. 70]). Поэтому при расчетах теоретической прочности кристаллических тел желательно делать поправку на сдвиговые деформации, а в интегральных критериях хрупкой прочности типа Новожилова целесообразно использовать уточненную оценку теоретической прочности кристаллических тел.

ЗАМЕЧАНИЕ. Неидеальность системы [3] может быть смоделирована наличием в ячейке примесного атома. В такой системе потеря устойчивости наступает существенно раньше. Например, для цепочки атомов критические нагрузки идеальной системы и системы с примесными атомами иногда отличаются на один-два порядка [9]. Отметим, что в работе [9] подобрана библиография по реальным физическим потенциалам и приведены результаты расчетов для десяти различных пар атомов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Андреев А. В., Корнев В. М., Тихомиров Ю. В. Обрыв атомных связей в вершине трещины. Потеря устойчивости участка цепочки атомов // Изв. РАН. Механика твердого тела. 1993. № 5. С. 135–146.
2. Hutchinson J. W., Twergaard V. Shear band formation in plane strain // Intern. J. Solids and Struct. 1981. V. 17, N 5. P. 451–470.
3. Томпсон Дж. М. Т. Неустойчивости и катастрофы в науке и технике. М.: Мир, 1985.

4. **Macmillan N. H., Kelly A.** The mechanical properties of perfect crystals // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1972. V. 330, N 1582. P. 291–308.
5. **Thompson J. M. T., Shorrock P. A.** Bifurcational instability of an atomic lattice // J. Mech. Phys. Solids. 1975. V. 23, N 1. P. 21–37.
6. **Коттерилл Р., Дояма М.** Энергия и атомная конфигурация полной и расщепленной дислокаций // Актуальные вопросы теории дислокаций: Сб. ст. М.: Мир, 1968. С. 135–168.
7. **Кристиан Дж.** Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978. Ч. 1. С. 164–192.
8. **Finnis M. W., Sinclair J. E.** A simple empirical N -body potential for transition metals // Philos. Mag. A. 1984. V. 50, N 1. P. 45–55.
9. **Корнев В. М., Тихомиров Ю. В.** Потеря устойчивости участка цепочки атомов при наличии примеси. Снижение прочности хрупких трещиноватых тел // ПМТФ. 1996. Т. 37, № 3. С. 160–173.

*Поступила в редакцию 23/VI 1997 г.,
в окончательном варианте — 4/XII 1997 г.*
