

ТЕОРИЯ СРЕД С СОХРАНЯЮЩИМИСЯ ДИСЛОКАЦИЯМИ: ОБЪЯСНЕНИЕ СИСТЕМАТИЧЕСКОГО ОТКЛОНЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ОТ ЗАКОНА ХОЛЛА-ПЕТЧА

Белов П.А.

РЕЗЮМЕ.

В работе на основе прикладной модели сред с полями сохраняющихся дислокаций, в рамках так называемой биплоской 2D-постановки, строится точное аналитическое решение для полубесконечной трещины. Классическое и построенное решение сравниваются путем анализа вытекающих из них вариантов уравнения закона Холла-Пётча. В результате сравнения делается вывод о том, что решение в рамках классической теории упругости приводит с необходимостью к уравнению закона Холла-Пётча, а неклассическое решение в рамках теории сред с сохраняющимися дислокациями дает возможность объяснить систематическое отклонение экспериментальных данных от этого закона. Кроме того, дается обоснование определения характерной длины когезионных взаимодействий в неклассических (градиентных) теориях (теории сред Коссера, теории Тупина, моментной теории Аэро-Кувшинского, «простейшей» теории когезионного поля) через такие стандартные характеристики материалов, как предел прочности/текучести и вязкость разрушения.

Ключевые слова: механика дефектных сред, теория Коссера, теория Тупина, теория Аэро-Кувшинского, поля сохраняющихся дислокаций, когезионные взаимодействия, теория трещин, закон Холла-Пётча, неклассические упругие характеристики.

ВВЕДЕНИЕ.

Формулировка прикладной теории сред с сохраняющимися дислокациями (ССД) изложена в [1]. Здесь приводятся только необходимые для дальнейшего изложения сведения. Лагранжиан L теории:

$$L = A - \frac{1}{2} \iiint [E_{ijnm} \frac{\partial R_i}{\partial x_j} \frac{\partial R_n}{\partial x_m} + \frac{1}{C^V} E_{ijrk} E_{nmrl} \frac{\partial^2 R_i}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\partial^2 R_n}{\partial x_l \partial x_m}] dV \quad (1)$$

Здесь A - работа внешних объемных P_i^V и поверхностных P_i^F нагрузок, $E_{ijnm} = \lambda \delta_{ij} \delta_{nm} + \mu \delta_{in} \delta_{jm} + \mu \delta_{im} \delta_{jn}$ - тензор классических модулей теории упругости, μ, λ - коэффициенты Ламе, C^V - неклассический модуль, R_i - вектор перемещений, V - объем тела. Вариационное уравнение, соответствующее требованию стационарности лагранжиана:

$$\begin{aligned} \delta L = & \iiint [E_{ijrk} (R_r - E_{nmrl} R_{n,lm} / C^V)_{,jk} + P_i^V] \delta R_i dV + \\ & + \iint [P_i^F - E_{ijrk} n_j (R_r - E_{nmrl} R_{n,lm} / C^V)_{,k}] \delta R_i dF - \\ & - \iint (E_{rqnm} R_{n,qm} / C^V) \delta (E_{rpjij} n_p R_{i,j}) dF = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь n_j - единичный орт нормали к поверхности F тела. Определения классического U_i и когезионного u_i перемещений через полное перемещение R_i :

$$\begin{cases} U_i = R_i - E_{ijnm} R_{n,jm} / C^V \\ u_i = -E_{ijnm} R_{n,jm} / C^V \end{cases} \Rightarrow R_i = U_i - u_i \quad (3)$$

Оператор и классические уравнения равновесия:

$$L_{ij}(\dots) = (\mu + \lambda)(\dots)_{,ij} + \mu\delta_{ij}\Delta(\dots) \quad L_{ij}U_j + P_i^V = 0 \quad (4)$$

Оператор и уравнения равновесия когезионных взаимодействий:

$$H_{ij}(\dots) = (\mu + \lambda)(\dots)_{,ij} + \mu\delta_{ij}\Delta(\dots) - C^V\delta_{ij}(\dots) \quad H_{ij}u_j + P_i^V = 0 \quad (5)$$

Биплоская 2D-постановка для трещины нормального отрыва.

По аналогии с плоской постановкой задач теории упругости, в биплоской постановке отсутствуют две компоненты перемещений. При этом единственная искомая компонента перемещений может зависеть от всех трех, двух, или одной из координат. Биплоская 2D-постановка определяет искомую компоненту перемещений как функцию двух координат $\{x, y\}$. Трещина определена как разрез в координатной плоскости, совпадающий с положительной частью оси ОХ. Объемные нагрузки отсутствуют. Поверхностные нагрузки на берегах трещины отсутствуют.

Фундаментальное решение, соответствующее классическому перемещению:

$$\nabla^2 U = 0 \quad (6)$$

Здесь $U = U_i Y_i = U(\bar{x}, y)$ - искомая компонента вектора классических перемещений, Y_j - орт оси ОУ, $\bar{x} = x\sqrt{(2\mu + \lambda)/\mu}$ - «растянутая» координата x , $\nabla^2(\dots) = \partial^2(\dots)/\partial\bar{x}^2 + \partial^2(\dots)/\partial y^2$ - плоский оператор Лапласа в «растянутых» координатах.

Фундаментальное решение, соответствующее когезионному перемещению:

$$l_E^2 \nabla^2 u - u = 0 \quad (7)$$

Здесь $u = u_i Y_i = u(\bar{x}, y)$ - искомая компонента вектора когезионных перемещений, $l_E = \sqrt{(2\mu + \lambda)/C^V}$. Фундаментальные решения в рамках прикладной теории сред с сохраняющимися дислокациями, соответствующие (6) и (7) строятся в полярной системе координат $\{r, \varphi\}$.

РЕШЕНИЕ В РАМКАХ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ.

Классические перемещения:

$$U(r, \varphi) = 2K_I r^{1/2} \text{Cos}(\varphi/2)/(2\mu + \lambda) \quad (8)$$

Классические напряжения:

$$\sigma_{yy} = K_I r^{-1/2} \text{Sin}(\varphi/2) \quad (9)$$

Предположим, что в некоторой точке среды одновременно: действующие напряжения становятся равными пределу прочности или текучести $\sigma_{yy} = \sigma_c$, а коэффициент интенсивности напряжений становится равным вязкости разрушения $K_I = K_{Ic}$. В дальнейшем будем просто говорить о критическом напряжении σ_c . Рассмотрим кривую, на которой в соответствии с построенным решением напряжения равны критическим:

$$r(\varphi) = \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_c}\right)^2 \text{Sin}^2(\varphi/2) \quad (10)$$

Осредняя $r = r(\varphi)$ по углу, можно получить характерный размер зерна d :

$$\frac{d}{2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} r(\varphi) d\varphi = \frac{1}{2} \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_c}\right)^2 \quad (11)$$

Обращая полученное соотношение, приходим к закону Холла-Пётча в классической теории упругости:

$$\sigma_c = K_{Ic} d^{-1/2} \quad (12)$$

Выдвинутая гипотеза с необходимостью приводит к следующей трактовке механизма разрушения среды с трещиной: перед вершиной трещины из среды «выкрашивается» зерно, имеющее форму (10). При этом, если зерно имеет достаточные размеры, чтобы его

внутренность являлась «представительным объемом», сценарий разрушения зерна должен не отличаться от сценария разрушения среды в целом. Если же среда имеет внутреннюю структуру (например, поликристаллическую), и размер зерна достаточно близок к размерам кристаллита, чтобы было возможно отождествить зерно с кристаллитом, тогда сценарий разрушения должен существенно измениться. Обобщая, аналогичную трактовку можно дать и для мелкодисперсных композитов в целом, если под зерном в этом случае понимать армирующую частицу.

Рассмотрим семейство траекторий равных напряжений, имеющих общую точку в вершине трещины, центры тяжести которых лежат на продолжении линии разреза, моделирующего трещину:

$$\sigma_{yy} = \sigma_c \frac{K_I}{K_{Ic}} \left(\frac{r}{d}\right)^{-1/2} \text{Sin}(\varphi/2) \quad (13)$$

Можно убедиться в том, что напряжения вне зерна меньше критических, а внутри – больше. Поэтому приходится закрывать глаза на то, что внутри зерна напряжения выше критических, а в окрестности вершины трещины они вообще не ограничены. Оправданием такой позиции может служить то, что в области, ограниченной контуром зерна, в соответствии с (1) уже нельзя быть уверенными в справедливости уравнений классической теории упругости, и что решение, полученное для этой области в рамках классической теории упругости, соответствует физической реальности. Действительно, при формулировке потенциальной энергии классической теории упругости как предельного случая (1) предполагается, что энергия, связанная с градиентами напряжений пренебрежимо мала по сравнению с энергией самих напряжений. Совершенно очевидно, что внутри зерна это предположение уже не применимо. В то же время, вне зерна, на некотором удалении от его контура, по этим же причинам уравнения теории упругости следует считать справедливыми. Соответственно, среди траекторий (13) должна существовать такая, с $d = d_{classic}$, что если $d \geq d_{classic}$ - решение в рамках классической теории упругости соответствует экспериментальным данным, при этом, скорее всего, $d_{classic}$ будет даже несколько больше, чем размер зерна. При $d < d_{classic}$ будут наблюдаться неклассические эффекты (не совпадающие с решением, полученным в рамках классической теории упругости), т.е. не объяснимые с точки зрения классической теории упругости. В пользу такого утверждения говорит тот факт, что при уменьшении размера зерна, начиная с некоторого, начинает наблюдаться систематическое отклонение уравнения закона Холла-Пётча от экспериментальных данных. С точки зрения изложенных выше рассуждений, этот минимальный размер зерна $d = d_{classic}$ и определяет область применимости классической теории упругости.

РЕШЕНИЕ В РАМКАХ ПРИКЛАДНОЙ ТЕОРИИ СРЕД С СОХРАНЯЮЩИМИСЯ ДИСЛОКАЦИЯМИ.

Введем безразмерную переменную $z = r/l_E$, тогда решение в рамках теории сред с сохраняющимися дислокациями приводит в соответствии с (6) и (7) к следующим соотношениям. Полные перемещения:

$$R(z, \varphi) = l_E \left\{ A_1 z^{-1/2} - C_1 K_{1/2}(z) + \frac{2K_I}{(2\mu + \lambda)l_E^{1/2}} z^{1/2} \right\} \text{Cos}(\varphi/2) \quad (14)$$

Полные напряжения:

$$\sigma(z, \varphi) = \left\{ [-A_1 z^{-3/2} + C_1 K_{3/2}(z)] \text{Sin}(3\varphi/2) + \left[\frac{2K_I}{(2\mu + \lambda)l_E^{1/2}} z^{-1/2} + C_1 K_{1/2}(z) \right] \text{Sin}(\varphi/2) \right\} (2\mu + \lambda)/2 \quad (15)$$

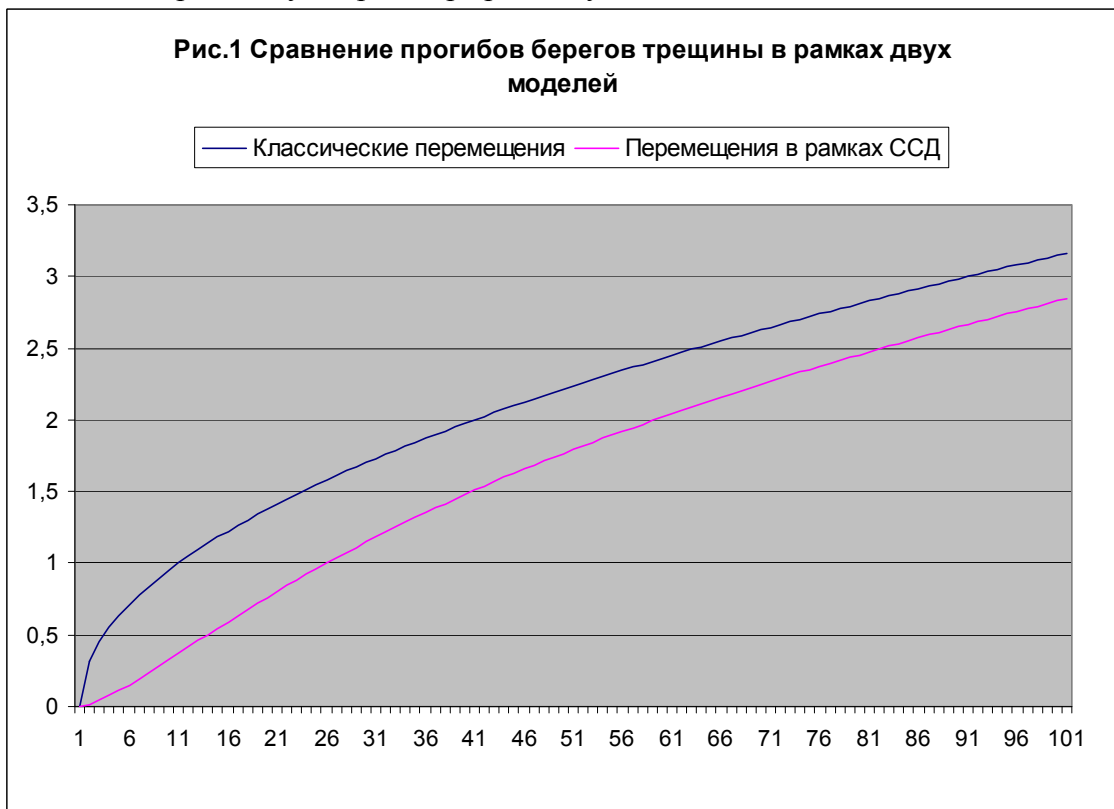
Здесь $K_{1/2}(z)$ и $K_{3/2}(z)$ - функции Макдональда полуцелого порядка.

Требование не сингулярности полных перемещений (14) в соответствии с (2) выполняется при условии $A_1 = C_1 \sqrt{\pi/2}$. Требование не сингулярности полных напряжений (15) в соответствии с (2) так же удается выполнить, не смотря на то, что в напряжениях, в общем случае, появляются две сингулярности. Первая, классическая, порядка $z^{-1/2}$, и вторая – порядка $z^{-3/2}$. Тем не менее, убирая классическую сингулярность с помощью $C_1 \sqrt{\pi/2} = -2K_I l_E^{-1/2} / (2\mu + \lambda)$, можно обнаружить, что при этом неклассическая сингулярность теряет два порядка за счет того, что предварительно было удовлетворено требование не сингулярности полных перемещений. В итоге, выражения для полных перемещений и полных напряжений становятся не сингулярными.

Выражения для перемещений приводятся к следующему виду:

$$\begin{aligned}
 R(z, \varphi) &= \frac{2K_I l_E^{1/2}}{(2\mu + \lambda)} z^{1/2} \left\{ \frac{e^{-z} - 1 + z}{z} \right\} \text{Cos}(\varphi/2) \\
 U(z, \varphi) &= -\frac{2K_I l_E^{1/2}}{(2\mu + \lambda)} (z^{-1/2} - z^{1/2}) \text{Cos}(\varphi/2) \\
 u(z, \varphi) &= -\frac{2K_I l_E^{1/2}}{(2\mu + \lambda)} z^{-1/2} e^{-z} \text{Cos}(\varphi/2)
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Здесь было использовано свойство функций Макдональда полуцелого порядка, позволяющее выразить их через элементарные функции. Не трудно обнаружить, что в отличие от классической трещины, угол раствора которой в вершине равен π , в неклассической трещине угол раствора равен нулю.



Также имеют место и отличия в кривизне берегов трещин: если кривизна классической монотонно возрастает, оставаясь все время отрицательной, то кривизна неклассической меняет знак, имея точку перегиба при $r = 1,067 l_E$. Примечательно, что расстояние от точки перегиба до вершины трещины практически совпадает с неклассическим параметром среды l_E , т.е. тоже может служить характеристикой материала. Этот факт может служить обоснованием для экспериментального определения этой единственной неклассической характеристики материала среды (в рассмотренной здесь модели).

Представляется, что расстояние от точки перегиба до вершины трещины или близкий к нему неклассический параметр среды l_E (характерная длина когезионных взаимодействий) являются естественным эталоном длины в задачах о не сингулярной трещине.

Интересно отметить, что фундаментальное решение, соответствующее классической части перемещений (16) приобретает сингулярность порядка $z^{-1/2}$, которая полностью компенсируется неклассической частью решения – когезионным перемещением.

$$u(z, \varphi) = -\frac{2K_I l_E^{1/2}}{(2\mu + \lambda)} [z^{-1/2} - z^{1/2} + O(z^{3/2})] \text{Cos}(\varphi/2)$$

В результате, полные перемещения не имеют сингулярности.

Идея допустимости рассмотрения и анализа классического решения с сингулярностью в перемещениях (вне некоторой области, окружающей вершину трещины) принадлежит проф., д.т.н., С.А. Лурье. В данной работе она получила свое подтверждение и формальное математическое обоснование.

Вернемся к выражению для полного напряжения. Оно приводится к следующему виду:

$$\sigma(z, \varphi) = \frac{K_I}{l_E^{1/2}} z^{1/2} \left\{ \frac{[z(1 - e^{-z}) - (e^{-z} - 1 + z)]}{z^2} \text{Sin}(3\varphi/2) + \frac{(1 - e^{-z})}{z} \text{Sin}(\varphi/2) \right\} \quad (17)$$

Траектории критических напряжений так же, как и в классическом случае, выделяют область, в которой напряжения превышают критические. Определим большие значения z так, что для них выполняется неравенство: $e^{-z} \ll 1$. Соответственно, уравнение траектории критических напряжений для этой области упрощается, и может быть записано явно:

$$z = \left(\frac{K_{In}}{\sigma_n l_E^{1/2}} \right)^2 \text{Sin}^2(\varphi/2) \quad (18)$$

Обозначим:

$$q = \frac{K_{Ic}}{\sigma_c l_E^{1/2}} \quad (19)$$

Таким образом, установлено, что с точностью до e^{-q^2} , решения в рамках классической теории упругости (10) и в рамках теории сред с сохраняющимися дислокациями (18) совпадают вне области, характерный размер которой равен $d_{classic} = (K_{Ic} / \sigma_c)^2$. Вторая подобласть – область умеренных z . Для этой области, как установлено выше, классическая теория упругости уже не применима. Уравнение траектории критических напряжений из выражения (17) уже не удастся записать явно. В неявном виде это уравнение имеет вид:

$$f(z, \varphi, q) = 0 \quad (20)$$

Здесь $f(z, \varphi, q) = qz^{1/2} \left\{ \left[\frac{(1 - e^{-z})}{z} - \frac{(e^{-z} - 1 + z)}{z^2} \right] \text{Sin}(3\varphi/2) + \frac{(1 - e^{-z})}{z} \text{Sin}(\varphi/2) \right\} - 1$.

Из (20) для каждого фиксированного q можно найти z явно, решая для соответствующих углов φ_i трансцендентное уравнение относительно z_i . В данной работе использовался шаг по углу, равный $\pi/18$. В результате получим:

$$z = z(\varphi, q) \quad (21)$$

Из (21) следует, что второй особенностью уравнения для траектории критических напряжений (20) является то, что форма траектории существенным образом зависит от параметра q (19), т.е. от неклассических свойств материала среды - характерной длины когезионных взаимодействий l_E . На рисунках, приведенных ниже, представлены области, выделенные траекториями критических напряжений.

Рис.2 Траектория критических напряжений при $q=3,0$

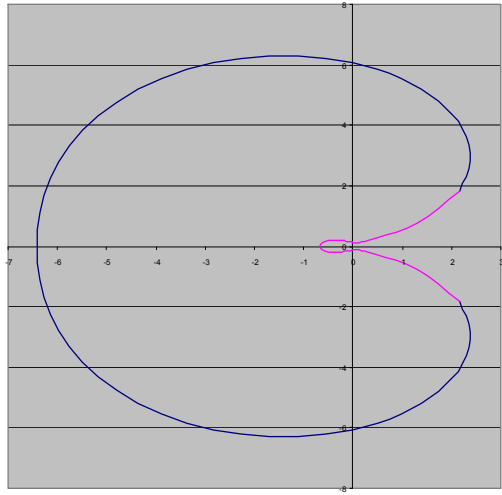


Рис.3 Траектория критических напряжений при $q=2,9$

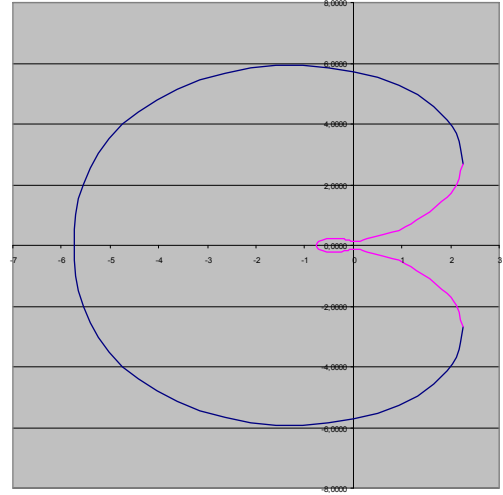


Рис.4 Траектория критических напряжений при $q=2,8$

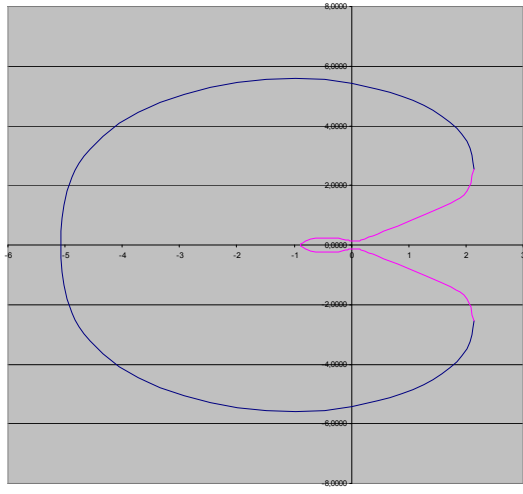


Рис.5 Траектория критических напряжений при $q=2,7$

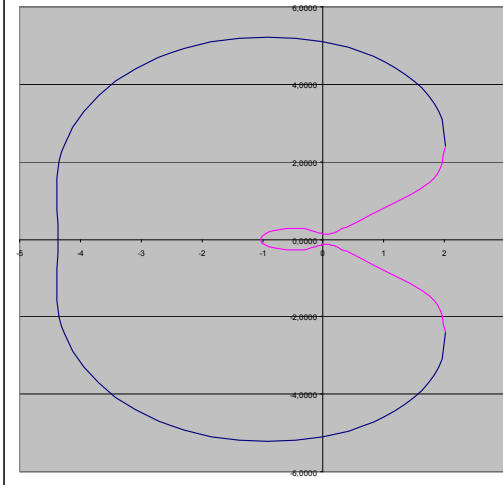


Рис.6 Траектория критических напряжений при $q=2,6$

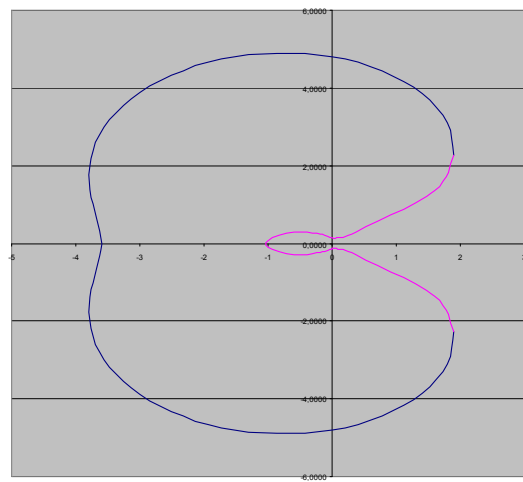
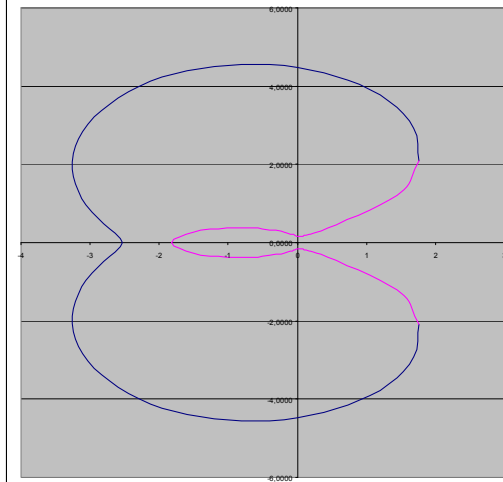
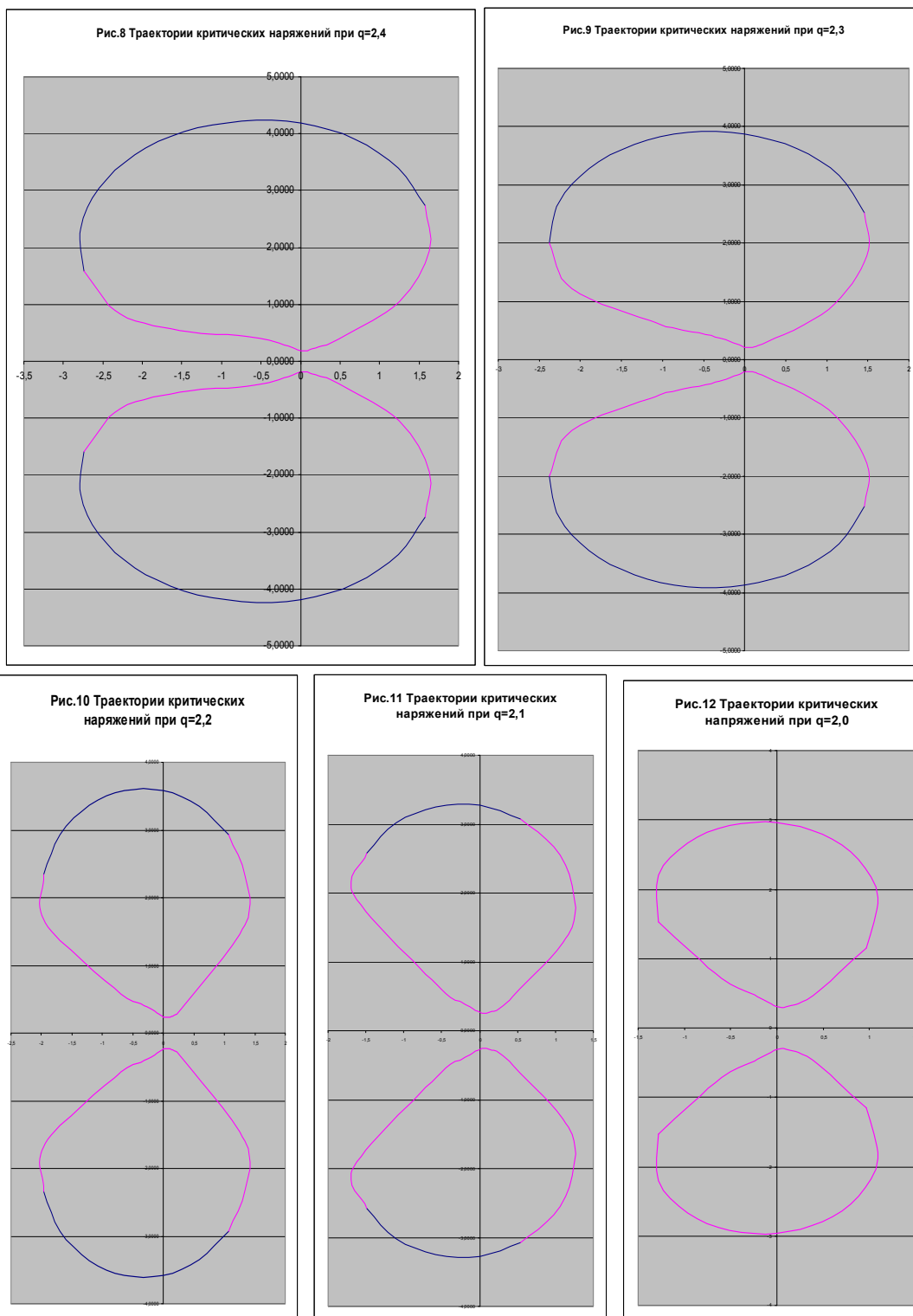


Рис.7 Траектория критических напряжений при $q=2,5$





Определим то значение параметра $q = q_c$, при котором происходит качественный скачок в свойствах «выкрошенного» зерна – вместо одного зерна из среды симметрично плоскости трещины начинает «выкрашиваться» два зерна. Математически этот случай эквивалентен тому, что при $\varphi = \pi$ уравнение (20) имеет не два корня, а один. Анализ этого условия приводит к тому, для среды, характеризующейся параметром $q_c = 2.489$, существует единственный корень $z_c = 2.149$. Соответственно, при $q > q_c$ траектория критических напряжений является замкнутой, не самопересекающейся, уравнение (20) при $\varphi = \pi$ имеет два корня. При $q = q_c$ траектория является самопересекающейся, уравнение (20) при $\varphi = \pi$ имеет один корень. При $q < q_c$ - в верхней и нижней

полуплоскости имеют место две, симметричные относительно оси ОХ, замкнутые траектории, уравнение (20) при $\varphi = \pi$ не имеет корней.

Вернемся к процедуре построения неклассического аналога уравнения закона Холла-Пётча. Осредняя (21) по углу, аналогично (11), можно получить связь между характерным размером зерна d и параметром q :

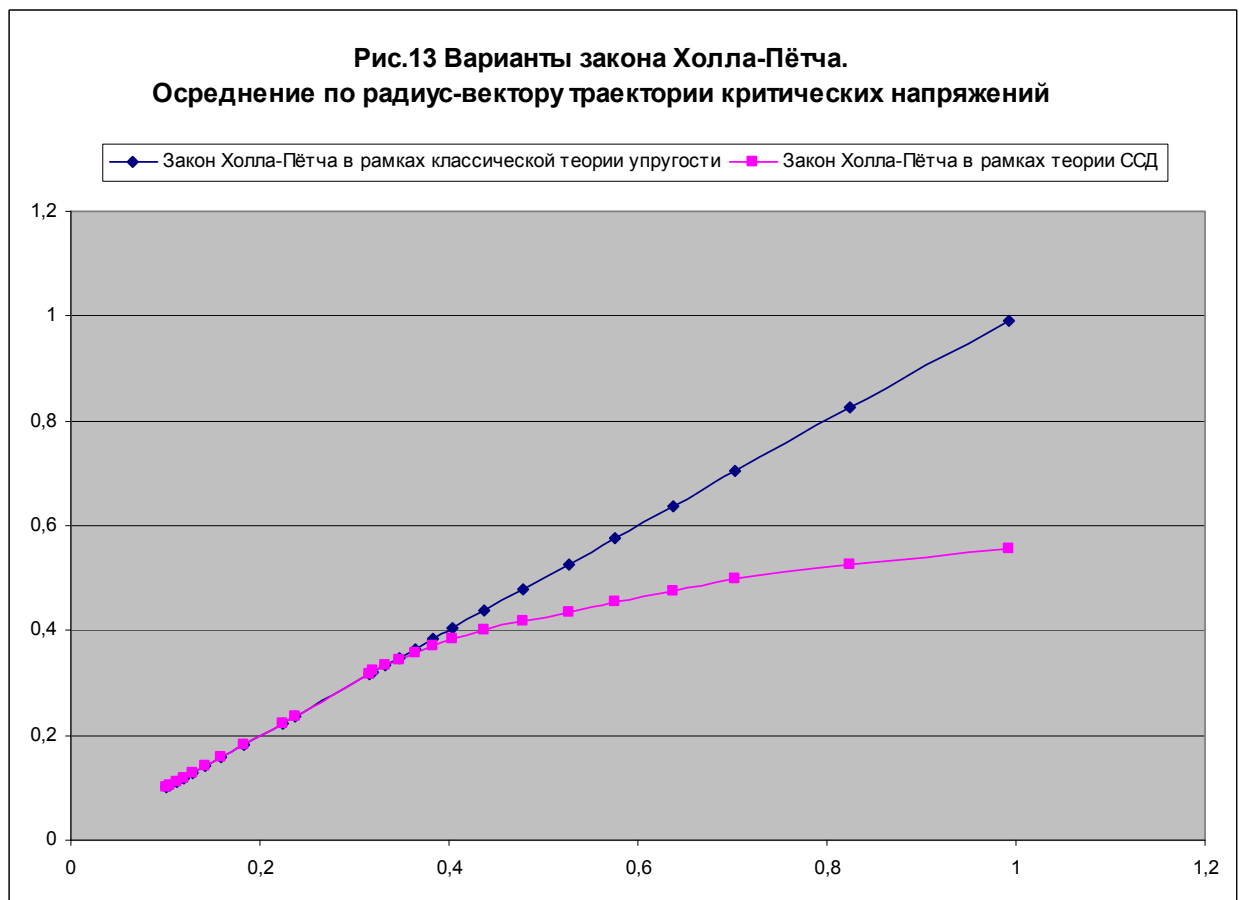
$$d = 2l_E \frac{1}{\pi} \int_0^\pi z(\varphi, q) d\varphi = d(q) \quad (22)$$

$$x_d = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi z(\varphi, q) \cos \varphi d\varphi \quad y_d = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi z(\varphi, q) \sin \varphi d\varphi$$

Здесь x_d и y_d - координаты центра окружности, радиусом $d/2$, полученной путем осреднения (методом наименьших квадратов) зависящего от угла φ радиус-вектора траектории критических напряжений (21). В результате, для траекторий, показанных на Рис.2-12, можно получить одиннадцать пар значений d, q , а через них, интерполяцией, и искомое соотношение $d = d(q)$. Обращение соотношения (22), приводит к неклассической формулировке закона Холла-Петча:

$$\sigma_{\bar{n}} = \frac{K_{Ic}}{q(d/l_E)l_E^{1/2}} \quad (23)$$

Сравнивая (23) и (12), можно убедиться в том, что параметр q при больших (d/l_E) имеет асимптотику $\lim_{(d/l_E) \rightarrow \infty} q(d/l_E) = (d/l_E)^{1/2}$.



При размерах зерна $d \geq d_{classic}$ имеют место свойства, определяемые в рамках классической теории упругости – «классический» закон Холла-Пётча (12), при размерах зерна $l_E < d < d_{classic}$ имеют место свойства, определяемые в рамках теории сред с сохраняющимися дислокациями, в соответствии с неклассическим вариантом закона

Холла-Пётча (23). Наконец, при $d < l_E$ нанокompозиты уже будут иметь свойства, которые следует определять в рамках теории сред с генерируемыми дислокациями, которую еще предстоит сформулировать.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

1. В рамках прикладной теории сред с сохраняющимися дислокациями, в биплоской 2D-постановке, построено точное аналитическое решение для трещины нормального отрыва. Оно отличается от классического тем, что напряжения в вершине трещины не имеют сингулярности, берега трещины имеют знакопеременную кривизну, расстояние от вершины трещины до точки перегиба (зона Баренблатта) определяется неклассическим параметром среды – характерной длиной когезионных взаимодействий в среде, угол раскрытия трещины в вершине равен не π , а нулю.

2. Дана оценка сверху величины характерной длины когезионных взаимодействий через такие стандартные характеристики материалов, как предел прочности/текучести и вязкость разрушения. Эта оценка может быть использована во всех градиентных теориях, разрешающие уравнения которых могут быть сведены к трем уравнениям равновесия в перемещениях четвертого порядка. К таким теориям можно отнести: теорию сред Коссера [2], теорию Тупина [3], моментную теорию Аэро-Кувшинского [4], теорию Джеремилло [5], «простейшую» теорию когезионного поля [6].

3. Предложена следующая последовательность трактовок неклассического решения (20). При достаточно больших размерах зерен, с диаметрами $d \geq d_{classic}$ из среды с трещиной «выкрашивается» единственное зерно, что соответствует трактовке классического решения. При размерах зерна, порядка $l_E < d < d_{classic}$ из среды «выкрашивается» два зерна. И, наконец, при $d < l_E$ из среды «выкрашивается» уже три зерна. Представляется, что эта трактовка полностью совпадает с классификацией наноструктурированных сред, предложенной недавно Глезером [7]. В соответствии с этой классификацией, «предложено разделить размерный ряд нанокристаллов на три группы: «большие», «средние» и «малые», в которых доминируют различные механизмы ..., определяемые преобладающим элементом структуры (собственно кристаллами, границами зерен или тройными стыками зерен соответственно)».

4. Предложена неклассическая формулировка уравнения закона Холла-Пётча. На её основе дано математическое обоснование систематического отклонения экспериментальных данных от классического варианта уравнения закона Холла-Пётча.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.

1. Белов П.А. «Теория сред с сохраняющимися дислокациями. Прикладная теория», «Механика композиционных материалов и конструкций», 2011, в печати.
2. Cosserat E., Cosserat F., «Theorie des Corps Deformables», 1909, Paris, Hermann.
3. Toupin R.A. «Elastic materials with couple-stresses», 1962, Arch. Ration. Mech. And Analysis, 11.
4. Аэро Э.Л., Кувшинский Е.В. «Основные уравнения теории упругости сред с вращательным взаимодействием частиц», 1960, ФТТ, т. 2, вып. 7.
5. Jaramillo T.J. «A generalization of the energy function of elasticity theory», Dissertation, Department of Mathematics, University of Chicago, 1929.
6. Белов П.А., Бодунов А.М., Лурье С.А., Образцов И.Ф., Яновский Ю. Г. «О моделировании масштабных эффектов в тонких структурах», «Механика композиционных материалов и конструкций», 2002, т.8, №4, стр. 585-598.
7. Глезер А.М. «Структурная классификация наноматериалов», «Деформации и разрушение материалов», 2010, №2.

Сведения об авторе:

Белов Петр Анатольевич,

к.ф.-м.н., докторант, нач. отд. прочности ГК «Ростехнологии», НПК «Композиционные материалы и технологии», ОАО «Московский Машиностроительный Экспериментальный Завод – Композиционные Технологии», г. Москва, Россия,

e-mail: BelovPA@yandex.ru, 8-915-3358835.