

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЛОЕНИЯ ДВУСЛОЙНЫХ НАНОТРУБОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОГЕЗИВНОЙ МОДЕЛИ

асп. Макаева Т.А., д.ф.-м.н. Журавков М.А., к.ф.-м.н. Чумак Н.Г.

Концепция когезивной зоны или зоны сцепления, впервые описанная в работах Дагдейла [1], Баренблатта [2], Райса [3], представляет собой особый подход к характеристике разрушения, не связанный непосредственно с энергетическим принципом и являющийся феноменологическим подходом представления поведения материала в зоне процесса разрушения, где появляются микротрещины или образуются пустоты. В классической механике разрушения предполагается, что трещина окружена неповрежденной средой. Более правильным, вероятно, является все же подход, при котором принимается во внимание и поврежденность окружающей среды. Такой подход разрабатывали, например, Янсон и Хульт[4], ориентированный на совместное использование механики поврежденности и механики разрушения.

Замечание. При приближении к вершине трещины напряжения быстро растут и достигают предела текучести, после чего материал начинает пластически деформироваться. Протяженность области текучести можно рассчитать по общеизвестным формулам. С этого момента можно считать, что реальная длина трещины – ее подлинная длина плюс размер пластически деформированной зоны.

Поле поврежденности вблизи кончика трещины не может быть оценено точно, так как скорость возникновения поврежденности сильно зависит от напряжений. Поэтому решение для общего случая может быть получено только численными методами. В какой-то мере это аналогично задаче об определении пластической области вблизи кончика трещины в упругопластической среде.

Задача существенно упрощается, если воспользоваться моделями типа модели М.Я.Леонова и В.В.Панасюка[5, 6] (δ_k -модель), по которой область сильной поврежденности считается ограниченной узкой полосой перед трещиной. Протяженность областей сильной поврежденности можно определять с помощью метода, предложенного Дагдейлом. Изначальное предложение, используемое в модели Дагдейла, состоит в представлении пластичной зоны около вершины трещины в виде узкой полосы, простирающейся впереди вершины трещины, где происходит взаимодействие между частью зоны пластичности и приложенной внешней нагрузкой. Эта концепция рассматривалась как типичная модель когезивной зоны с зоной текучести или когезивная зона (рис. 1).

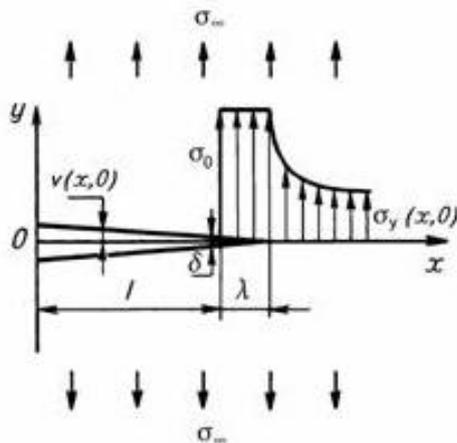


Рис. 1. Модель трещины с когезивной зоной

На основе внутренней атомной природы процесса разрушения, Баренблатт [7] ввел понятие сил сцепления между поверхностями трещины вблизи кончика трещины, распределенных таким образом, что геометрия раскрытия кончика трещины преобразуется в «плавный клин», а результирующее поле напряжений уже не имеет особенностей. Теоретическая модель Баренблатта основана на условии конечности напряжений и построена на таких гипотезах, как малость области, на которой действуют силы сцепления между частицами, по сравнению с размерами трещины, а также независимость формы трещины в вершинной области от действующих нагрузок. В такой постановке рост трещины происходит, когда силы сцепления не могут выдержать концентрацию напряжений. Условие распространения трещины формулируется, исходя из гипотезы плавности смыкания ее берегов и решения Снеддона. Данная теория разрушения привела к появлению нового численного подхода для моделирования распространения трещин.

В рассматриваемой когезивной модели разрушение происходит между двумя соседними виртуальными поверхностями трещины (когезивными поверхностями), которые подвергаются сопротивлению присутствующим силам сцепления. Когезивные силы между близлежащими поверхностями трещины, обусловленные межатомными силами, работают как сопротивление распространению трещины. До определенного значения параметра раскрытия трещины δ когезивная сила продолжает увеличиваться. После достижения δ критического значения сила сцепления уменьшается до нуля. Таким образом, межповерхностное притяжение берегов трещины уменьшается, и виртуальные поверхности отделяются друг от друга, определяя образование макроскопической трещины. Напряженное состояние между когезивными поверхностями развивается в соответствии с определенными феноменологическими законами нагружения-разгрузки материала, которые носят название законов когезивности или законов расслоения материала.

Замечание. Несмотря на кажущуюся универсальность теории поврежденности существует одно очень существенное ограничение на ее использование – достоверные результаты эта теория дает только при рассмотрении разрушения тела находящегося в условиях обобщенного растяжения (в некоторых случаях и в состоянии обобщенного сдвига).

Существуют два основных подхода к определению закона расслоения: по данным экспериментальных измерений и феноменологический, с использованием определенных функциональных зависимостей исследуемых параметров. Поскольку не существует единого эффективного экспериментального метода для непосредственного измерения когезивных параметров, поэтому мало кто из исследователей проводил эксперименты, связанные с определением законов расслоения материалов [8].

В мировой практике общепринятым подходом считается использование определенных законов расслоения с когезивными параметрами, рассматриваемыми как константы моделирования, и которые определяются путем сравнения результатов моделирования когезивной зоны и экспериментальных данных. Ключевыми особенностями модели когезивной зоны являются форма кривой расслоения и значения когезивных параметров.

Были предложены и успешно применены многие варианты моделей когезивной зоны для прогнозирования поведения разрушения. Нидлман [9] впервые предложил полиномиальный закон для описания процесса зарождения пустот в металлах. Сюй и Нидлман [10] далее использовали экспоненциальные модели для изучения зарождения пустот в сплошных и композитных материалах, быстрого роста трещины в хрупком материале при динамической нагрузке. Твиргард и Хатчинсон [11] использовали трапецевидную модель расслоения, чтобы оценить сопротивление росту трещин в упруго-пластических материалах. Ортис и Суреш [12] приняли линейный когезивный закон

для межзеренного разрушения, когда притяжение растет линейно до момента открытия границы зерна, достигая критического значения, а затем падает до нуля. Различные формы когезивных законов имеют общую особенность: величина когезивного притяжения увеличивается с постепенным разделением когезивных поверхностей, а после достижения критического значения падают до нуля с последующим разделением материала. Убывание напряжения после пикового значения означает разгрузку материала в процессе разрушения. Ключевыми параметрами, описывающими модель когезивной зоны, являются: когезивная прочность, определяемая пиковым значением кривой расслоения; когезивная энергия, которая представлена площадью под кривой расслоения; и характерная величина расслоения. Прочность сцепления (когезивная прочность) является максимальной величиной сопротивления к разрушению и, как правило, связана с пределом текучести материала. Энергия связи (когезивная энергия) представляет собой разрушение, сопровождающее расслоение материала. Было доказано, что параметры когезивной зоны, вообще говоря, не являются характеристиками материала, а зависят от конкретных условий моделирования. Основными факторами моделирования когезивной зоны являются микроструктурные и континуальные свойства материала, масштаб деформации и особенности трещины.

Рассмотрим некоторые модельные задачи расслоения двуслойных нанотрубок со следующими геометрическими параметрами : $R_{\min} = 5\text{нм}$, $R_{\max} = 5,68\text{нм}$, $L = 50\text{нм}$. При моделировании нанотрубки представляются как полые цилиндры, жестко соединенные между собой с модулем Юнга $E = 1\text{ТПа}$ и коэффициентом Пуассона $\nu = 0.28$, и подверженные соответственно изгибающей, растягивающей и сжимающей нагрузкам. Расчеты выполнялись в конечно-элементном пакете AnsysWorkbench 14.5. При моделировании расслоения использовался билинейный закон расслоения (рис.2) со значениями когезионной силы, равными предельным напряжениям для соответствующих видов нагружения.

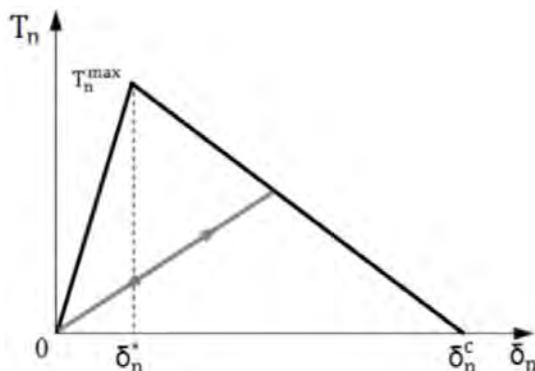


Рис. 2. Билинейный закон расслоения

Отношение между нормальной когезивной силой T_n и нормальным перемещением δ_n может быть выражено следующей формулой:

$$T_n = K_n \delta_n (1 - D_n) \quad (1)$$

где K_n – нормальная когезивная жесткость T_n^{\max} / δ_n^* ;

T_n^{\max} – максимальное значение нормальной когезивной силы σ_{\max} ;

δ_n^* – параметр раскрытия трещины (нормальное перемещение) при T_n^{\max} ;

δ_n^c – параметр раскрытия трещины при расслоении;

δ_n^{\max} – максимальное значение раскрытия трещины;

D_n – параметр поврежденности материала, равный

$$D_n = \begin{cases} 0, \delta_n^{\max} \leq \delta_n^* \\ \left(\frac{\delta_n^{\max} - \delta_n^*}{\delta_n^{\max}} \right) \left(\frac{\delta_n^c}{\delta_n^c - \delta_n^*} \right), \delta_n^* < \delta_n^{\max} \leq \delta_n^c \\ 1, \delta_n^{\max} > \delta_n^c \end{cases} \quad (2)$$

На рисунках 3–4 представлены графики распределения перемещений, деформаций и напряжений для нанотрубки, жестко закрепленной с правого края и находящейся под действием силы $F_y = 1 \cdot 10^{-5} \text{ N}$, направленной вверх и приложенной к внешней поверхности цилиндра. Значения когезионных параметров принимались $T_n^{\max} = 14 \text{ ГПа}$, $\delta_n^c = 0.1 \text{ нм}$.

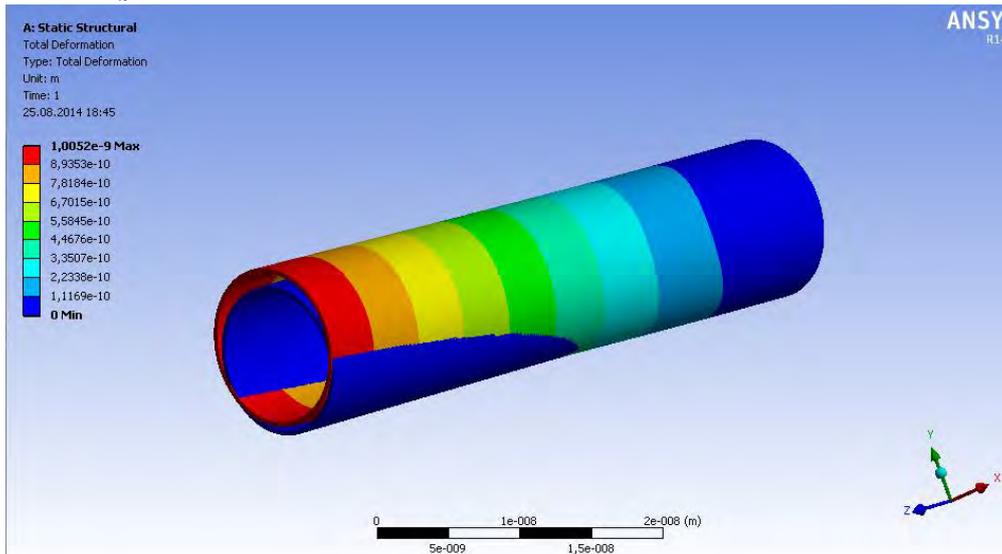


Рис. 3. График распределения полных перемещений нанотрубок при изгибе

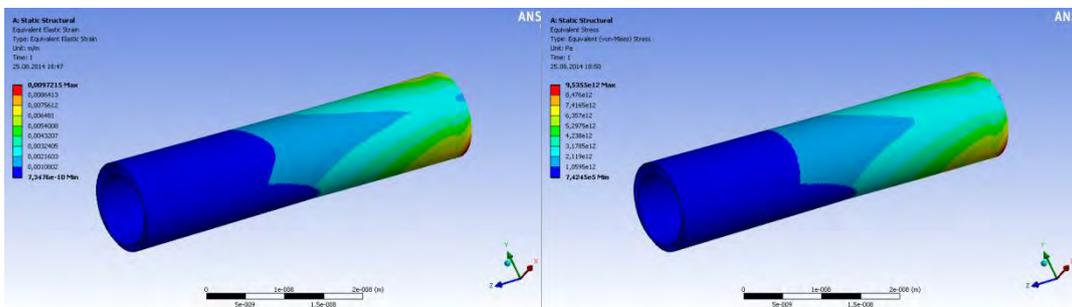


Рис. 4. График распределения эквивалентных (по Мизесу) напряжений и деформаций нанотрубок при изгибе

Также в процессе выполнения численного расчета для этой модельной задачи были получены графики распределения зазора и вдавливания между расслоившимися поверхностями нанотрубки, графики распределения сдвигового напряжения и нормального давления в зоне контакта поверхностей нанотрубки.

Для нанотрубки, находящейся под действием растягивающей нагрузки $F_z = 1 \cdot 10^{-3} \text{ N}$, приложенной к внутреннему слою нанотрубки с левой стороны также были получены графики распределения зазора, проскальзывания, нормального давления и сдвиговых напряжений. При этом нанотрубка жестко закреплена с другой стороны и по внешней поверхности. Значения когезионных параметров принимались равными $T_\tau^{\max} = 45 \text{ ГПа}$, $\delta_\tau^c = 0.1 \text{ нм}$.

При решении другой модельной задачи также были найдены графики распределения зазора, проскальзывания, нормального давления и сдвиговых напряжений для нанотрубки, находящейся под действием сжимающей нагрузки $F_z = 1 \cdot 10^{-3} N$, приложенной к внешнему слою нанотрубки с обеих сторон. Внутренний слой нанотрубки жестко закреплен с двух сторон. Значения когезионных параметров принимались равными $T_\tau^{\max} = 10 \text{ ГПа}$, $\delta_\tau^c = 0.1 \text{ нм}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Dugdale D.S. *Yielding of Steel Sheets Containing Slits. Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 1960; 8: 100-108.
2. Баренблатт Г.И. Математическая теория равновесных трещин, образующихся при хрупком разрушении. // Журнал прикладной механики и технической физики. 1961. № 4. С.3-56.
3. Rice J.R. *Mathematical analysis in the mechanics of fracture. Fracture: An Advanced Treatise* 1968; 2: 191–311.
4. Хульм Я. Поврежденность и распространение трещин. // В кн. Механика деформируемых твердых тел: направления развития. - М.: Мир, 1983. - С. 230 – 243.
5. Леонов М.Я. Элементы теории хрупкого разрушения. // Журнал прикладной механики и технической физики. 1961. № 3. С.85-92.
6. Панасюк В.В. Предельное равновесие хрупких тел с трещинами. Киев: Наук.думка, 1968. 246с.
7. Barenblatt, G. I., 1962, "The Mathematical Theory of Equilibrium Cracks in Brittle Fracture," *Adv. Appl. Mech.*, 7, pp. 55–129.
8. Tan H., Liu C. et al. *The cohesive law for the particle/matrix interfaces in high explosives. Journal of Mechanics and Physics of Solids* 2006; 53: 1892-1917.
9. Needleman A. *A Continuum Model for Void Nucleation by Inclusion Debonding. Journal of Applied Mechanics* 1987; 54: 525-531.
10. Xu X.P., Needleman A. *Void nucleation by inclusion debonding in a crystal matrix, Modeling Simulation Material Science Engineering*, 1993, 1, 111-132.
11. Tvergaard, V.; Hutchinson, J. W. *The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. 1992, Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40, 1377–1397.
12. Ortiz M. and Suresh S. *Statistical Properties of Residual Stresses and Intergranular Fracture in Ceramic Materials. Journal of Applied Mechanics* 1993; 60: 77-84

E-mail: zhuravkov@bsu.by
nstelmakh@yahoo.com
makaevata@yahoo.com

Поступила в редакцию 12.10.2016