

**Ильина В.В.**

Республиканский учебно-методический центр гражданской защиты КЧС МВД РК,  
г. Алматы, Казахстан, e-mail: vilalm@mail.ru

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЗАРОЖДЕНИЯ РАЗРУШЕНИЯ В ДЕФОРМИРУЕМОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ**

В работе представлена компьютерная модель развития динамического процесса разрушения в деформируемом структурном материале. Использование метода молекулярной динамики позволило выявить важные детали физического механизма зарождения разрушения, связанные с размерными эффектами, которым уделялось недостаточно внимания в прежних работах, в частности, вклад волновых процессов. Оценены физические параметры динамики атомной системы в классическом приближении, показано удовлетворительное соответствие с известными экспериментальными данными. Результаты работы будут способствовать лучшему пониманию данных методов акустической эмиссии при контроле состояния материалов конструкций ядерных реакторов, транспортных систем, строительных сооружений, геофизических структур.

**Ключевые слова:** разрушение, деформация, волновые процессы, компьютерное моделирование.

Ilyina V.V.

Republican Educational and Methodological Center for Civil Protection of the Ministry  
of Emergency Situations of the Republic of Kazakhstan, Almaty, e-mail: vilalm@mail.ru

### **Study of dynamics of the fracture nucleation in a crystal material deformed**

Computational modeling of the dynamics process of fracture in a deformed crystal material is presented. Molecular dynamic technique using allows to show some important features of the physical nature of the fracture nucleation, linked with size-effects, involving wave processes. Some physical characteristics of the system are determined in classical approximation and sufficiently good accordance with known experimental data is shown. Results of the paper will be useful for evaluating methods of structural materials, used for building the nuclear power reactors, transportation systems, geophysical areas, when controlled by acoustic emission and other commonly used methods.

**Key words:** fracture, deformation, wave processes, computer simulation.

Ильина В.В.

ҚР ІІМ ТЖК «Азаматтық қорғау республикалық оқу-әдістемелік орталығы» ЖШС,  
Алматы қ., Қазақстан, e-mail: vilalm@mail.ru

### **Деформацияланған кристаллдық ортадағы бұзылу туындауының динамикасын зерттеу**

Бұл жұмыста деформацияланған құрылымдық материалдағы динамикалық процесс дамуының компьютерлік моделі ұсынылған. Алдыңғы жұмыстарда, атап айтқанда, толқынды процестердің үлесіне жеткіліксіз назар аударылмағандықтан молекулярлық динамика әдісінің қолданылуы өлшемді әсерлерге байланысты бұзылу туындау механизмінің маңызды физикалық бөлшектерін айқындауға мүмкіндік берді. Классикалық жуықтауындағы атомдық жүйе

динамикасының физикалық параметрлері бағаланып, белгілі эксперименттік деректермен қанағаттанарлық сәйкестік көрсетілді. Жұмыстың нәтижелері ядролық реакторлық конструкциялардың, көлік жүйелерінің, құрылыстық құрылымдардың, геофизикалық құрылымдардағы материалдарды бақылау кезінде акустикалық эмиссия әдісінің көмегімен алынған мәліметтерді жақсырақ түсінуге мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** бұзылу, деформация, толқындық процестер, компьютерлік модельдеу.

## Введение

Возможность **мониторингового контроля** состояния конструкционных материалов узлов и блоков **ядерных реакторов, энергетических установок, строительных сооружений, геофизических структур**, нарушение целостности которых потенциально опасно для населения целых регионов, привлекает значительное внимание исследователей и инженеров [1-4], до настоящего времени оставаясь исключительно актуальным.

По общепринятой классификации методы контроля состояния материалов подразделяются на разрушающие и неразрушающие. Очевидно, что при оценке ответственных узлов и деталей конструкций и различных систем, повреждение которых представляет определенную опасность либо в принципе невозможно, приемлемы только неразрушающие методы. Одним из них является метод регистрации низкочастотных (далее мы используем аббревиатуру НЧ) колебаний, возникающих в материалах на стадиях зарождения и развития разрушения. В технике этот метод часто определяют как метод акустической эмиссии (АЭ). Он дает возможность наблюдать за протеканием динамических процессов, например, за зарождением и ростом микротрещин [5-6]. Этот метод достаточно широко применяется при исследовании макроскопических образцов металлов и сплавов.

В то же время, следует признать, что закономерности НЧ волновых процессов в материалах, их физические механизмы и источники в структурных материалах изучены недостаточно. Существующие на данный момент методики предварительной и последующей обработки сигналов НЧ эмиссии при пластической деформации и разрушении не позволяют определять доминирующие механизмы, ответственные за излучение низкочастотных волн в деформируемом материале, что в некоторых случаях затрудняет понимание деталей физических механизмов динамического зарождения и развития процессов разрушения. Это снижает вероятность получения точного прогноза поведения материала в последующие моменты времени.

В такой ситуации компьютерное моделирование [7-9] процессов, происходящих в материалах, деформируемых средах, приобретает особую важность, т.к. позволяет с малыми затратами и без нарушения штатного режима работы сложных технических систем и риска для реальных конструкций и отдельных узлов получить большой объем информации о поведении материалов в экстремальных условиях. Это особенно эффективно в отношении мониторинга конструкционных материалов ядерных реакторов [10, 11], доступ к которым в обычных условиях практически невозможен, а целостность их часто является гарантией безопасной эксплуатации мощных энергетических систем, обслуживающего персонала и даже населения региона.

Неразрушающий мониторинг, дающий надежную информацию о состоянии конструкционных материалов ядерного энергетического реактора, – залог безопасности как самого реактора так и экологической системы региона и его населения.

Сходные подходы могут быть использованы и для мониторинга состояния строительных конструкций высотных зданий, мостов, торговых и культурно-развлекательных, выставочных центров, а также кристаллических горных пород, что имеет прямой выход на проблему прогнозирования землетрясений.

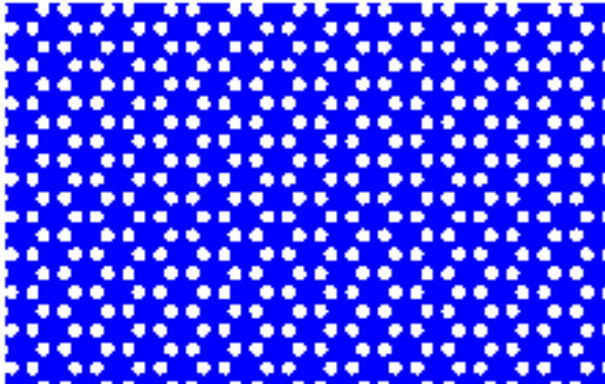
Представленная работа имела целью построение компьютерной модели деформируемой условной структурной среды и отработку метода молекулярной динамики для получения характеристик возникающего в среде волнового поля.

## Компьютерное моделирование и расчеты

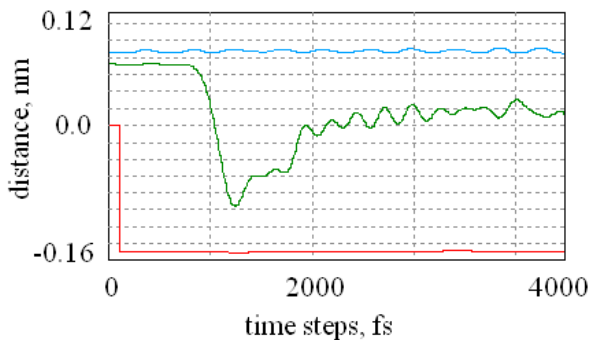
Компьютерное моделирование методом молекулярной динамики и численные расчеты велись в среде **ChemOffice**, **располагающей** достаточно совершенными графическими возможностями.

Деформация границ кристалла осуществлялась дискретными или последовательными малыми скачкообразными смещениями атомов крайних слоев на небольшую величину. После

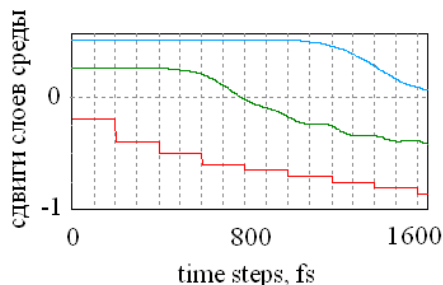
этого атомы второго и далее расположенных слоев в течение периода релаксации занимали новые соответствующие положения.



**Рисунок 1** – Фрагмент модельного двумерного нанокристалла, использованного для расчетов



**Рисунок 2** – Графики распространения фронта продольной волны деформации от границы в объем кристалла. Единичный инициирующий скачок деформации на границе показан красным цветом



**Рисунок 3** – Графики распространения фронта продольной деформации от границы в объем кристалла в процессе последовательных сдвигов граничного слоя (красный цвет)

На рис. 2 показаны графики продвижения фронта деформации растяжением после единичного скачкообразного смещения границы ( $X = 0$ ), а также в процессе последовательных скачков, удлиняющих кристалл в направлении  $XX$ . Красным цветом показано смещение границы кристалла, зеленый график относится к слою, находящемуся на расстоянии 2.5 нм от границы, синий – к слою на глубине 10.8 нм. Отчетливо выражена особенность на зеленом графике обозначила момент времени, когда фронт деформации дошел до слоя 2.5 нм.

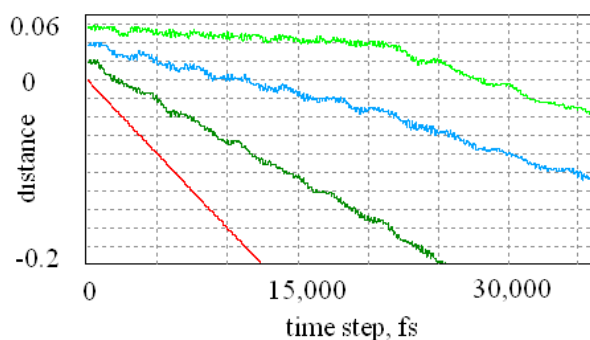
Дальнейшая немонотонность графика связана с волновой природой распространения деформационного возмущения. Видно, что за выбранное время расчета волна деформации еще не достигла слоя на глубине (синий график). Аналогичные измерения проводились в случае процесса деформации, развернутого во времени (рис.3). Представленные результаты иллюстрируют методику определения скорости продольной волны  $V_p$ . Можно отметить, что измеряемое значение скорости несколько возросло при увеличении дистанции, использованной для измерения времени прохождения, выходя на плато при 5.0 -6 км/с.

При определении скорости поперечной волны  $V_s$  использовалась аналогичная методика, но деформация на границе задавалась ступенькой сдвига вдоль направления  $ZZ$  всей границы или небольшого участка в центре. Было обнаружено, что при локализованном в центре источнике сдвиговой волны ее скорость несколько выше, чем в случае, когда источником является вся граница. По-видимому, это связано с тем, что при локализации источника эмиссии в пределах нескольких нанометров эффективный модуль сдвига ( жесткость среды) увеличивается.

Предварительный анализ данных о смещениях частиц среды показал, что первоначальный импульс чистого сдвига на границе очень быстро трансформируется в смешанный тип волны в объеме кристалла. Средняя скорость распространения сдвиговой деформации  $V_s$  составила примерно 3000 – 4000 м/с. Результаты моделирования показали, что скорости распространения волн деформации в модельной наноразмерной среде хорошо коррелируют с известными значениями для макроскопического материала (приблизительно 5 000 м/сек), хотя это изначально не предполагалось.

Ниже приведены результаты наблюдений за характером колебательных процессов в кристаллите, подвергнутому растяжению с постоянной

скоростью. В определенный момент в центре кристаллита происходил разрыв связей между частью атомов, расположенных вдоль ZZ точно в центральной части. Причем деформирование кристалла не прекращалось. Время компьютерного эксперимента выбиралось достаточно большим, что обеспечивало возможность проследить за волновым полем кристалла как в процессе деформации до разрыва, так и после него.



**Рисунок 4** – Графики X-смещения частиц в различных слоях кристалла, подвергнувшегося растяжению с постоянной скоростью

На рис.4 представлены временные графики X-смещений частиц, расположенных в кри-

сталле при различных значениях X, но на одном уровне Z. В интервале времени меньше 4000 шагов отчетливо видны особенности, отвечающие различным временам достижения Р-волной слоев кристалла, расположенных ближе к центру. Разрыв в кристалле произошел в момент, соответствующий 20000 шагов. После этого прослеживаются закономерности «обратного хода» т.е. связанные с движением возникшей при разрыве волны деформации от центра к границам. Отчетливо видно, что характер колебаний в среде после момента разрыва изменился.

### Заключение

Полученные результаты показывают, что при рассмотрении процессов разрушения в материалах следует учитывать динамику кристаллической решетки, и использование метода молекулярной динамики очень эффективно. Возможно, что на этой основе удастся разработать эффективные методы мониторинга состояния материалов с использованием НЧ эмиссии, точно локализирующие положение потенциального очага разрушения, и степень его развития, исходя из характеристик волнового поля НЧ акустической эмиссии, создавая базу для прогнозирования возникновения возможности разрушения.

### Литература

- 1 Sovacool B.K., A Critical Evaluation of Nuclear Power and Renewable Electricity in Asia // Journal of Contemporary Asia. – 2010 – Vol. 40. – No. 3. – P. 381.
- 2 Соболев Г.А., Пономарев А.В. Физика землетрясений и предвестники. – М.: Наука, 2003. – 270с.
- 3 Ильина В.В., Тулеева С.В. и др. Исследование начальной стадии разрушения деформируемой кристаллической среды по характеристикам волнового поля // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. Барнаул. – 2006. – Т.3. – №1. – С.79-81.
- 4 Paton James. Fukushima Crisis Worse for Atomic Power Than Chernobyl, UBS Says // Bloomberg Businessweek. – April 4. 2011.
- 5 Aggelis D.G. Characterization of Advanced Structural Materials by Acoustic Emission Indices // Nova Sci. Publishers Inc. – 2011. – 53.
- 6 Caprino G., Teti R. Quantitative Acoustic Emission for Fracture Behaviour of Laminates // J.Comp.Mat. – 1994. – V.28 (13) – P. 1237-1249.
- 7 Gutierrez A, Guihou J. Computational simulation of fracture of Materials in Comminution Devices. // Minerals Engineering. – 2014. – V.61 – P.73-81.
- 8 Bolokhonov R.R., Romanova V.R., Martynov S.A. Simulation of deformation and fracture of materials // Physical Mesomechanics – 2013. – V.16, 2. – P.133-140.
- 9 Talladi T., Schwartz A. Simulation of indentation fracture in crystalline materials // J.Am. Chem. Soc. – 2002. – V.124 (33). – P. 9912.
- 10 Roberts J.T. Structural Materials in Nuclear Power Systems – Springer Sci., 2013. – 485p.
- 11 Koutski J., Kocic J., Radiation Damage of Structural Materials. – Elsevier, 2013. – 362p.

### References

- 1 B.K. Sovacool, Journal of Contemporary Asia, 40 (3), (2010).
- 2 G.A. Sobolev, A.V. Ponomarev, Fizika zemletryaseniy i predvestniki. (Moscow, Nauka, 2003), p.270. (in Russ)
- 3 V.V. Il'ina, S.V. Tuleyeva i dr. Fundamental'nyye problemy sovremennogo materialovedeniya, 3, (1), 79-81, (2006). (in Rus)
- 4 Paton James. Fukushima Crisis Worse for Atomic Power Than Chernobyl, UBS Says // Bloomberg Businessweek. – April 4, 2011.
- 5 D.G. Aggelis Characterization of Advanced Structural Materials by Acoustic Emission Indices (Nova Sci. Publishers Inc., 2011), 53 p.
- 6 G. Caprino, R. Teti, J.Comp.Mat., 28 (13), 1237-1249, (1994).
- 7 A. Gutierrez, J. Guihou, Minerals Engineering 61, 73-81, (2014).
- 8 R.R. Bolokhonov, V.R. Romanova, S.A. Martynov, Physical Mesomechanics 16 (2), 133-140, (2013).
- 9 T. Talladi, A. Schwartz, J.Am. Chem. Soc. 124 (33), 9912, (2002).
- 10 J.T. Roberts Structural Materials in Nuclear Power Systems (Springer Sci., 2013), 485p.
- 11 J. Koutski, J. Kocik, Radiation Damage of Structural Materials. (Elsevier, 2013), 362p.