

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
MATHEMATICAL MODELLING



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2023-29-4-106-116

УДК 519.6

Дата: поступления статьи: 13.09.2023  
после рецензирования: 25.10.2023  
принятия статьи: 05.12.2023

**К.А. Мушанкова**

Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация  
E-mail: karinamushankova@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6081-1169>

**Л.В. Степанова**

Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация  
E-mail: stepanovaLv2015@yandex.ru. ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-6693-3132>

ОПЫТ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАКЛОННЫХ ТРЕЩИН В МАТЕРИАЛАХ  
С КУБИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ<sup>1</sup>

**АННОТАЦИЯ**

В данной статье проведено сравнительное сопоставление атомистических и континуальных угловых зависимостей компонент тензора напряжений у вершины трещины в пластине, ослабленной центральным дефектом, из анизотропного линейно-упругого материала с кубической сингонией упругих свойств в условиях смешанного нагружения. Атомистические распределения напряжений получены посредством метода молекулярной динамики, выполненного в программном коде Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) для монокристаллической гранцентрированной кубической (ГЦК) меди. Континуальные распределения напряжений получены на основании аналитического решения теории упругости анизотропных сред с привлечением методов теории функции комплексного переменного и последующим разложением комплексных потенциалов для нормального отрыва и поперечного сдвига в ряды по собственным функциям. В ходе молекулярно-динамического расчета варьировались: 1) угол между направлением главной оси симметрии материала в плоскости пластины и трещиной и 2) угол между трещиной и направлением действующей растягивающей нагрузки. Взаимодействия между отдельными атомами в системе были представлены потенциалом внедренного (погруженного) атома. Основной фокус настоящего исследования находится в компаративном сопоставлении двух принципиально различных подходов моделирования: дискретного (метод молекулярной динамики) и континуального (концепция сплошности). Результаты сравнения полученных атомистического и континуального решений показали, что угловые распределения компонент тензора напряжений находятся в хорошем соответствии друг с другом. Можно заключить, что решения и подходы классической механики хрупкого разрушения "работают" на атомистических расстояниях от вершины трещины, даже в случаях небольшого количества атомов.

**Ключевые слова:** метод молекулярной динамики; потенциал внедренного атома; кубическая сингония; поля напряжений.

**Цитирование.** Мушанкова К.А., Степанова Л.В. Опыт моделирования наклонных трещин в материалах с кубической кристаллической структурой // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2023. Т. 29, № 4. С. 106–116. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-106-116>.

**Информация о конфликте интересов:** авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

<sup>1</sup>Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ в рамках научного проекта № 21-11-00346.

© Мушанкова К.А., Степанова Л.В., 2023

*Карина Артемовна Мушанкова* — магистрант кафедры математического моделирования в механике, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

*Лариса Валентиновна Степанова* — доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой математического моделирования в механике, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

## Введение

Появление заметной трещины на макроскопическом уровне является следствием распространения трещины в нескольких масштабах, сильно отличающихся по длине. Наименьший масштаб — это разрыв связей между атомами по мере распространения трещины. Движущей силой, стоящей за разрывом соединения, является поле напряжений, обусловленное нагрузкой, приложенной к образцу. Поскольку материал разрушается, когда концентрация напряжений превышает предел прочности материалов на разрушение, анализ разрушения напрямую связан с концентрацией напряжений или деформаций вокруг вершины трещины. Механическая реакция материалов, подверженных экстремальному приложенному напряжению, контролируется атомистическими механизмами вблизи концентраторов напряжений, таких как вершины трещин. В настоящее время атомистическое моделирование оказалось полезным инструментом для изучения свойств материалов, при разрушении путем исследования атомистической конфигурации и поля напряжений вокруг вершины трещины с атомистической точки зрения. В последнее время пристальное внимание уделяется атомистическим напряжениям, обусловленным разрушением кристаллографической решетки материала вдоль границ зерен. Проведенные исследования показали, что усилия, возникающие вдоль границ зерен, вычисленные с помощью компонент тензора атомистических напряжений, могут служить количественными дескрипторами границ зерен [1]. Дескрипторы дают возможность предсказать напряжение, соответствующее критической эмиссии дислокаций и свойства абсорбции или пропускания непосредственно из атомистической структуры границы зерен [1–3]. Концепция атомистических напряжений в настоящее время широко применяется для изучения разрушения на атомистическом масштабе, а также для того, чтобы пролить свет на поведение таких материалов как металлическое стекло, гранулированные материалы на атомном уровне [4–6]. Это связано с тем, что атомистическое напряжение может быть широко интерпретировано как напряжение, эквивалентное напряжению Коши, которое позволяет срастить между собой атомистические явления и процессы, описываемые механикой сплошных сред [4–6]. В моделировании классической молекулярной динамики (MD) взаимодействие между атомами определяется межатомным потенциалом, и атомистические напряжения могут быть непосредственно вычислены из теоремы вириала [7]. Следует отметить, что понятие атомистического напряжения все еще актуально за пределами области MD, однако его нелегко определить количественно. Например, в расчетах теории функционала плотности (DFT) глобальное (макроскопическое) квантово-механическое напряжение может быть получено из изменения полной энергии как функции равномерной деформации [8; 9]. Однако локальное изменение напряжения, или напряжение, приходящееся на атом, внутри суперячейки DFT не может быть однозначно определено количественно, несмотря на то что межатомные потенциалы в MD часто калибруются по DFT [10–13]. Определение локального квантово-механического напряжения, приходящееся на атом в DFT, с помощью аналитических или численных методов в настоящее время является активной областью исследований [13–15]. Аналогичным образом понятие атомистического напряжения недостаточно четко определено в экспериментах по просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM). Однако достижение субнанометрового разрешения измерений внутренней деформации может стать реальностью благодаря новым методам, таким как наноразмерная голографическая интерферометрия [16–18] или использование движущихся дислокаций в качестве механических зондов [19].

В настоящее время текущие результаты [20–26] получены в специальной атомистической конфигурации, когда трещина лежит в плоскости, параллельной одной из плоскостей симметрии [21–26]. Эволюция микроструктуры и процесс разрушения монокристаллических материалов могут быть иными, если изменить ориентацию кристалла. Кроме того, атомный потенциал и ограничивающие условия также могут влиять на процесс атомарного разрушения и эволюцию внутренней микроструктуры. Чтобы понять более общий процесс разрушения материала и микромеханизмы монокристаллов на атомарном уровне, необходима более подробная и расширенная модель MD.

Для восполнения имеющегося пробела в настоящей статье изучена пластина из монокристаллической меди, ослабленная наклонной трещиной. Трещина наклонена под различными углами по отно-

шению к главным осям симметрии кристаллической решетки материала с кубической симметрией его упругих свойств. Вычисления выполнены с помощью метода молекулярной динамики, реализованного в программе Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS). Ведущей целью вычислений было сравнение угловых распределений компонент тензора напряжений, ассоциированных с вершиной трещины, полученных методом молекулярной динамики, и полученных с помощью аналитического решения задачи, построенного с использованием методов теории упругости анизотропного тела [27–29].

## 1. Моделирование наклонного дефекта в материалах с кубической кристаллической решеткой

Для исследования полей напряжений в окрестности вершины трещины на наноразмерном уровне был написан скрипт для LAMMPS. В рамках поставленной задачи построения пластинки с центральным дефектом на наноскопическом уровне удобно оперировать с размерностями Å для длины, ps для времени и бар для напряжения, поэтому применялась команда `units metal`. Несмотря на то что исследуемый объект — пластинка, все же она будет обладать некоторой толщиной в несколько атомов, поэтому в коде прописывалась размерность пространства `dimension 3`. Задавались периодические граничные условия во всех направлениях `boundary p p p`. Определение стиля представления частиц `atom_style atomic` означает, что будет рассматриваться простейший случай, когда каждая частица в системе считается точечной без внутренней структуры или ориентации. Задание решетки (в данном случае гранцентрированная кубическая решетка с параметром решетки 3.615 Å) определяется командой `lattice fcc 3.615`. Создание бокса для размещения атомов размерами 120×120×3 в единицах параметра решетки `region box prism 0 120 0 120 0 3 0 0 0` (часто бывает удобным моделировать именно призму, поскольку в случаях, когда к пластине прикладывается сдвиговая нагрузка, происходит наклон ее боковых границ, в таких ситуациях `region box block` выдает ошибку). В результате было смоделировано 172 800 атомов. Для создания области с 3 типами атомов в указанном регионе используется команда `create_box 3 box`. Команда `create_atoms 1 region box` создает атомы типа 1 внутри региона `box`. Для создания трещины длины 10 (в единицах параметра решетки) определялось два региона, представляющих верхнюю и нижнюю области, где были определены атомы типов 2 и 3. На рис. 1.1 атомы первого типа обозначены цифрой 1, второго — цифрой 2, третьего — 3. Регионы выделялись из соображений, чтобы трещина располагалась под углом 45 градусов как к осям симметрии рассматриваемого материала с ГЦК-решеткой, так и по отношению к прикладываемой далее нормальной нагрузке. Потенциал взаимодействия между атомами устанавливался командой `pair_style eam`, где `eam` — `embedded atom method`, то есть использовался потенциал внедренного атома. Командой `pair_coeff * * Cu_u3.eam` задавались коэффициенты потенциала, определенные в файле `Cu_u3.eam`. Чтобы исключить взаимное влияние друг на друга атомов типа 2 и 3, использовалась команда `neigh_modify exclude type 2 3`. Напряжения на атом рассчитывались командой `compute peratom all stress/atom`. Для моделирования прикладываемой нормальной нагрузки в 80 ГПа использовалась команда `fix npt`, температура поддерживалась равной 10 К для уменьшения влияния пластических деформаций. Командой `dump` формировался файл, позволяющий получить данные временной эволюции полей напряжений, воспринимаемые пакетами для визуализации. Кадры, иллюстрирующие реакцию пластинки на растяжение для компонент тензора напряжений  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{12}$  на временных шагах 4 ps, 7 ps, 9 ps, полученные в пакете OVITO, представлены на рис. 1.2.

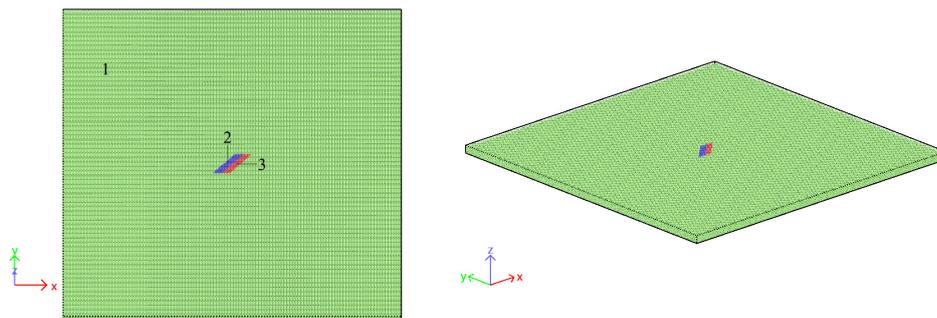


Рис. 1.1. Геометрия пластинки с центральной трещиной  
 Fig. 1.1. Geometry of a plate with a central crack

Компоненты тензора напряжений в LAMMPS определяются согласно формуле для тензора вириальных напряжений, которая была получена путем определения тензора напряжений Коши в терминах атомистических величин [30]:

$$\sigma_{av} = -\frac{1}{V} \left[ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha \neq \beta}} \overline{\mathbf{f}_{\alpha\beta} \otimes (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)} + \sum_{\alpha} m_{\alpha} \overline{\mathbf{v}_{\alpha}^{rel} \otimes \mathbf{v}_{\alpha}^{rel}} \right],$$

где  $\mathbf{r}_{\alpha}, \mathbf{r}_{\beta}$  — радиус-векторы частиц  $\alpha, \beta$ ;  $\mathbf{v}_{\alpha}^{rel}$  — вектор скорости частицы  $\alpha$ ,  $\mathbf{f}_{\alpha\beta}$  — сила, действующая на частицу  $\alpha$  со стороны частицы  $\beta$ .

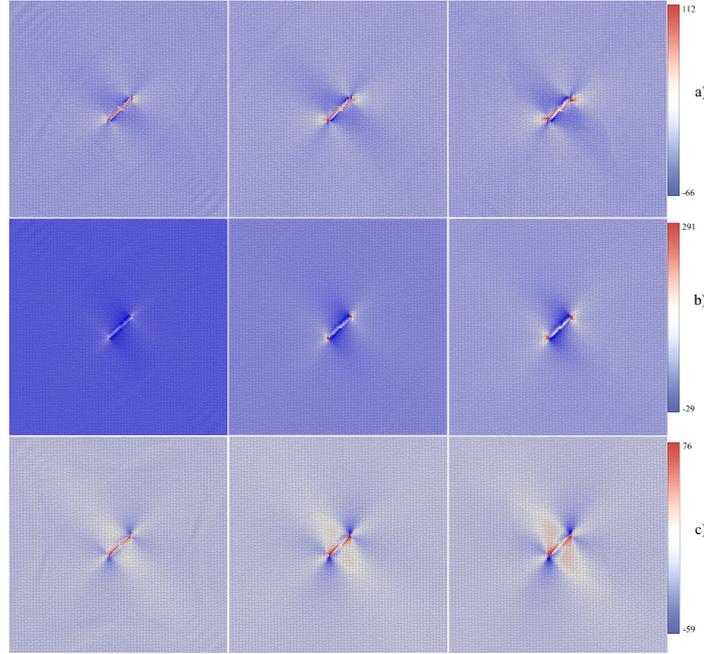


Рис. 1.2. Распределение полей напряжений  $\sigma_{11}$  — а),  $\sigma_{22}$  — б),  $\sigma_{12}$  — в) на временных шагах 4 пс, 7 пс, 9 пс

Fig. 1.2. Distribution of stress fields  $\sigma_{11}$  — a),  $\sigma_{22}$  — b),  $\sigma_{12}$  — c) at time steps of 4 ps, 7 ps, 9 ps

## 2. Аналитическое представление полей напряжений в анизотропных материалах с кубической сингонией

В статье [27] приведено асимптотическое решение, учитывающее ортотропную симметрию упругих свойств материала:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} &= 2Re \left( \sum_{k=1}^{\infty} A_k \frac{i^{(k+1)^2}}{\mu_1 - \mu_2} r^{\frac{k}{2}-1} \begin{bmatrix} \mu_2^2 \mu_1^{\frac{(-1)^{n+1}+1}{2}} (\cos\theta + \mu_2 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} - \mu_1^2 \mu_2^{\frac{(-1)^{n+1}+1}{2}} (\cos\theta + \mu_1 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} \\ \mu_1^{\frac{(-1)^{n+1}+1}{2}} (\cos\theta + \mu_2 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} - \mu_2^{\frac{(-1)^{n+1}+1}{2}} (\cos\theta + \mu_1 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} \\ - \left( \mu_2 \mu_1^{\frac{(-1)^{n+1}+1}{2}} (\cos\theta + \mu_2 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} - \mu_1 \mu_2^{\frac{(-1)^{n+1}+1}{2}} (\cos\theta + \mu_1 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} \right) \end{bmatrix} \right) + \\ &+ 2Re \left( \sum_{k=1}^{\infty} B_k \frac{i^{(k+1)^2}}{\mu_1 - \mu_2} r^{\frac{k}{2}-1} \begin{bmatrix} \mu_2^2 \mu_1^{\frac{(-1)^{n+1}}{2}} (\cos\theta + \mu_2 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} - \mu_1^2 \mu_2^{\frac{(-1)^{n+1}}{2}} (\cos\theta + \mu_1 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} \\ \mu_1^{\frac{(-1)^{n+1}}{2}} (\cos\theta + \mu_2 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} - \mu_2^{\frac{(-1)^{n+1}}{2}} (\cos\theta + \mu_1 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} \\ - \left( \mu_2 \mu_1^{\frac{(-1)^{n+1}}{2}} (\cos\theta + \mu_2 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} - \mu_1 \mu_2^{\frac{(-1)^{n+1}}{2}} (\cos\theta + \mu_1 \sin\theta)^{\frac{n}{2}-1} \right) \end{bmatrix} \right), \quad (2.1) \end{aligned}$$

где  $A_i, B_i$  — амплитудные множители поля напряжений,  $\mu_1, \mu_2$  — константы, описывающие материал (корни характеристического уравнения),  $r, \theta$  — полярные координаты с полюсом в вершине трещины.

Амплитудные коэффициенты для бесконечной анизотропной пластины с центральной трещиной при одноосном нагружении:

$$A_1 = \frac{\sqrt{2a}}{4} \sigma \sin^2 \alpha, \quad B_1 = \frac{\sqrt{2a}}{4} \sigma \sin \alpha \cos \alpha,$$

$$A_2 = \frac{\sigma}{2Im(\mu_1 + \mu_2)} [\cos^2\alpha + Re(\mu_1\mu_2)\sin^2\alpha + \lambda Re(\mu_1 + \mu_2)], \quad B_2 = \frac{\sigma Re(\mu_1 + \mu_2)}{2Im(\mu_1\mu_2)} [\sin\alpha \cos\alpha - \lambda],$$

$$A_3 = \frac{3}{8\sqrt{2}a}\sigma\sin^2\alpha, \quad B_3 = \frac{3}{8\sqrt{2}a}\sigma\sin\alpha \cos\alpha,$$

$$A_{2n+2} = B_{2n+2} = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$A_{2n+3} = \frac{(-1)^{n+1}\sigma\sin^2\alpha}{8(2a)^{n+\frac{1}{2}}} \left[ -4 \times \frac{1 \times 3 \times 5 \times \dots(2n-1)}{2 \times 4 \times 6 \times \dots 2n} + \frac{3 \times 5 \times 7 \times \dots(2n+1)}{4 \times 6 \times 8 \times \dots(2n+2)} \right], \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$B_{2n+3} = \frac{(-1)^{n+1}\sigma\sin\alpha \cos\alpha}{8(2a)^{n+\frac{1}{2}}} \left[ -4 \times \frac{1 \times 3 \times 5 \times \dots(2n-1)}{2 \times 4 \times 6 \times \dots 2n} + \frac{3 \times 5 \times 7 \times \dots(2n+1)}{4 \times 6 \times 8 \times \dots(2n+2)} \right], \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

где  $\lambda$  — действительный параметр, характеризуемый величиной смещения тела как абсолютно твердого,  $\alpha$  — угол наклона трещины,  $a$  — половина длины трещины,  $\sigma$  — прикладываемая к пластине нормальная нагрузка.

Поскольку кубическая симметрия упругих свойств является частным случаем ортотропной, приведенное решение можно применить к поставленной задаче для определения полей напряжений монокристалла ГЦК-меди. Константы исследуемого материала  $\mu_1 = 0.708728 + 0.705482i$ ,  $\mu_2 = -0.708728 + 0.705482i$  были получены из тензора упругих модулей в статье [23]. Для сравнения асимптотического решения и результатов МД-моделирования для компонент тензора напряжения  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  и  $\sigma_{12}$ , полученных аналитически, был выполнен поворот на 45 градусов.

### 3. Сравнение аналитического решения и результата МД-моделирования

На рисунках 3.1–3.3 слева изображены контурные графики, построенные по асимптотическому решению, обобщающему решение Уильямса, при удержании 20 слагаемых, справа представлены результаты моделирования, выполненные в программном пакете LAMMPS, где визуализируются вириальные напряжения. Справа приведены кадры из OVITO, показывающие распределение компонент тензора напряжений рис. 3.1 —  $\sigma_{11}$ , рис. 3.2 —  $\sigma_{22}$ , рис. 3.3 —  $\sigma_{12}$ . На графиках, полученных методом молекулярной динамики, четко видно как расположена трещина относительно осей симметрии рассматриваемого материала с ГЦК-решеткой. На всех графиках напряжения имеют размерность ГПа, а трещина располагается в 3 четверти под углом 45 градусов к главным осям материала.

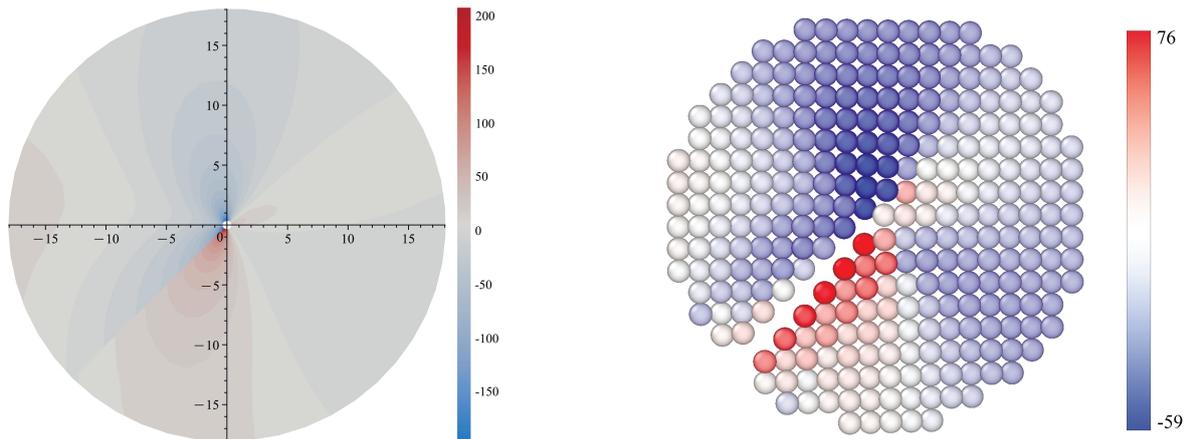


Рис. 3.1. Контурный график, построенный согласно аналитическому решению (слева), и распределение полей напряжений, полученное путем МД-моделирования (справа), для компоненты тензора напряжений  $\sigma_{11}$

Fig. 3.1. Contour plot plotted according to the analytical solution (left) and the distribution of stress fields obtained by MD modeling (right) for the stress tensor component  $\sigma_{11}$

На рис. 3.1 как слева, так и справа можно видеть характерные области минимальных и максимальных напряжений, представленных различными оттенками в соответствии со шкалой. Область максимальных напряжений как на контурном графике, так и на визуализации МД-решения расположена под трещиной, область минимальных напряжений на обоих графиках образуют характерные петли, приходящиеся на центр между 1 и 2 четвертями окружностей.

На рис. 3.2 приведены визуализации нормальной компоненты тензора напряжений. Как на левом, так и на правом графиках концентрация напряжений приходится на вершину дефекта, а берега трещины обладают сравнительно меньшими значениями напряжений. Максимальные напряжения формируют некие петлеобразные области, распространяющиеся вправо от вершины трещины, и наблюдаются как для аналитического решения, так и для численного.

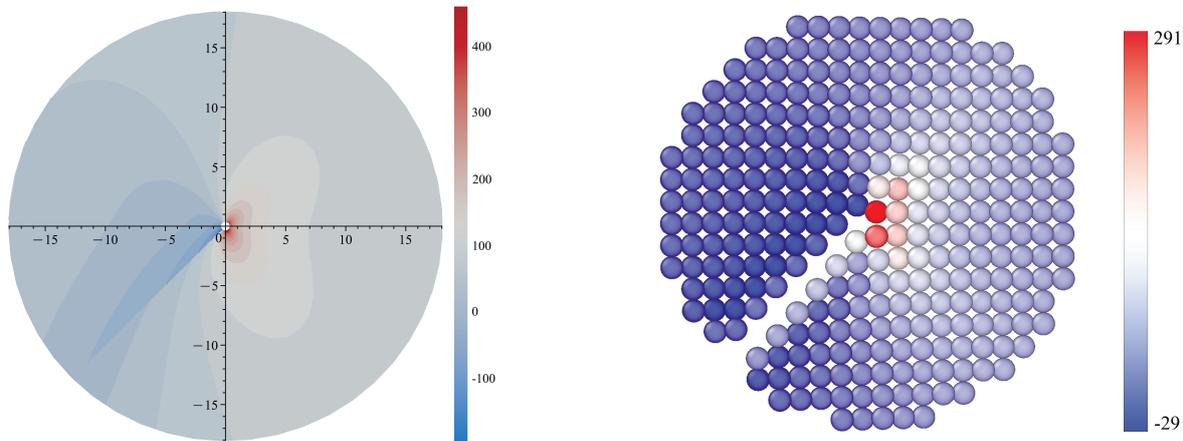


Рис. 3.2. Контурный график, построенный согласно аналитическому решению (слева), и распределение полей напряжений, полученное путем МД-моделирования (справа), для компоненты тензора напряжений  $\sigma_{22}$

Fig. 3.2. Contour plot plotted according to the analytical solution (left) and the distribution of stress fields obtained by MD modeling (right) for the stress tensor component  $\sigma_{22}$

Сравнение результатов асимптотического решения и молекулярно-динамического для касательной компоненты тензора напряжений  $\sigma_{12}$  представлено на рис. 3.3. Так же, как и для компонент тензора напряжений  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ , между результатами, полученными различными методами, для  $\sigma_{12}$  наблюдается схожий характер распределения напряжений. Максимальные напряжения приходятся на вершину трещины, а затем петлеобразно распространяются вправо на уменьшение. Минимальные напряжения тоже имеют петлеобразный характер и распространяются влево с угасанием по модулю.

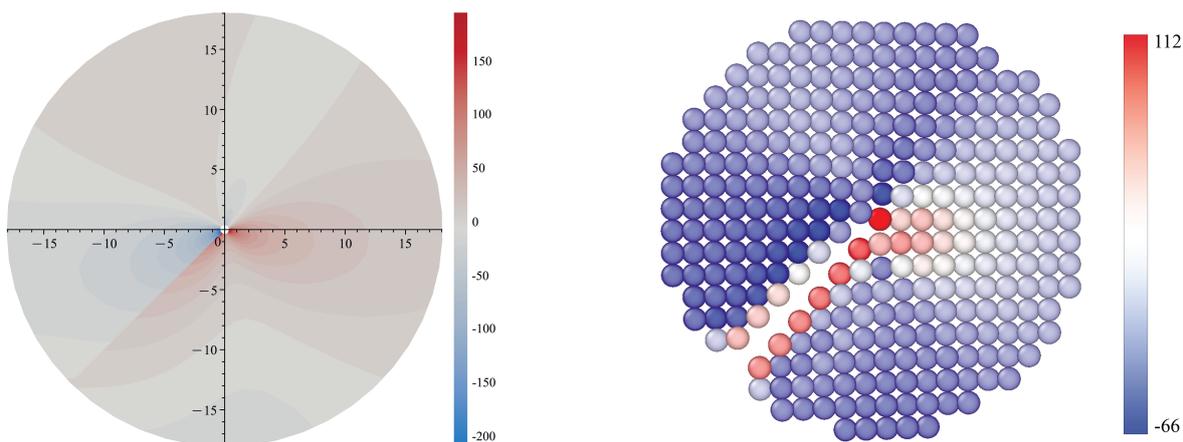


Рис. 3.3. Контурный график, построенный согласно аналитическому решению (слева), и распределение полей напряжений, полученное путем МД-моделирования (справа), для компоненты тензора напряжений  $\sigma_{12}$

Fig. 3.3. Contour plot plotted according to the analytical solution (left) and the distribution of stress fields obtained by MD modeling (right) for the stress tensor component  $\sigma_{12}$

Для молекулярно-динамического решения выделялась кольцевая область в окрестности вершины трещины, и далее было проведено сравнение угловых распределений для компонент тензора напряжений  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  и  $\sigma_{12}$  на расстоянии  $r/a = 0.75$  (рис. 3.4).

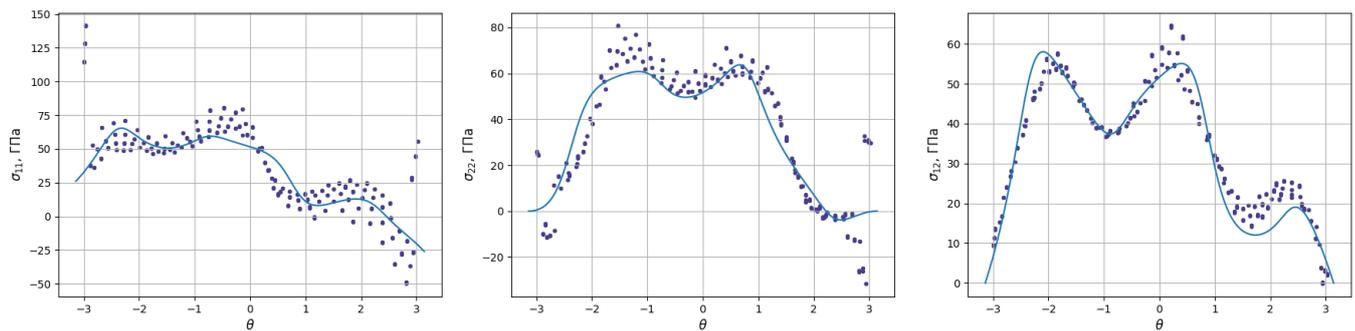


Рис. 3.4. Угловые распределения для компонент тензора напряжений  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  и  $\sigma_{12}$ , где линия — результат аналитического решения, точки — данные, полученные МД-методом  
 Fig. 3.4. Angular distributions for stress tensor components  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  and  $\sigma_{12}$ , where the line is the result of the analytical solution, the points are data obtained by the MD method

## Выводы

В данной статье выявлено хорошее совпадение атомистических и континуальных полей напряжений у вершины трещины в условиях смешанного нагружения в анизотропной среде с кубической симметрией упругих свойств. Атомистические распределения напряжений, ассоциированные с вершиной трещины, получены с помощью метода молекулярной динамики. Континуальные распределения получены из теоретического решения задачи определения напряженно-деформированного состояния у вершины трещины, базирующегося на методах теории упругости анизотропных сред и последующего разложения комплексных потенциалов по собственным функциям. В рамках молекулярно-динамического вычислительного эксперимента рассмотрена монокристаллическая гранецентрированная медь при низкой температуре, с тем чтобы выделить упругий режим деформирования монокристалла, и был использован потенциал внедренного атома. Отличительной особенностью проведенного молекулярно-динамического моделирования является рассмотрение трещины, которая составляет различные углы с плоскостями симметрии кристалла. В окрестности вершины трещины выбирались точки, лежащие в кольцевых областях, на различном расстоянии от вершины трещины и различной толщины, и строились зависимости компонент тензора напряжений в зависимости от полярного угла. Сравнение угловых зависимостей, полученных посредством атомистического расчета и с помощью теоретического решения, показало их хорошую согласованность. Обнаружено, что сходство угловых зависимостей компонент тензора напряжений наблюдается при всех изученных значениях двух углов: угла между осью симметрии кристаллической решетки (в плоскости пластины) и направлением трещины и углом между направлением действия растягивающей нагрузки и линией трещины.

В силу указанного свойства решений можно заключить, что решения континуальной механики разрушения могут служить для описания полей напряжений на атомистических расстояниях от вершины дефекта.

## Литература

- [1] Cui Y., Chew H.B. Machine-Learning Prediction of Atomistic Stress along Grain Boundaries // *Acta Materialia*. 2022. Vol. 222. Article number 117387. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117387>.
- [2] Li R., Chew H.B. Grain boundary traction signatures: Quantitative Predictors and Dislocation Emission // *Physical Review Letters*. 2016. Vol. 117. Issue 8. Article number 085502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.085502>.
- [3] Li R., Chew H.B. Grain boundary traction signatures: Quantifying the asymmetrical dislocation emission processes under tension and compression // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2017. Vol. 103. P. 142–154. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.03.009>.
- [4] Wu W.-P., Yao Z.-Z. Molecular dynamics simulation of stress distribution and microstructure evolution ahead of a growing crack in single crystal nickel // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2012. Vol. 62. P. 67–75. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.tafmec.2013.01.008>.
- [5] Yamakov V., Saether E., Phillips D.R., Glaesgen E.H. Molecular-dynamics simulation-based cohesive zone representation of intergranular fracture processes in aluminum // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2006. Vol. 54, Issue 9. Pp. 1899–1928. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2006.03.004>.

- [6] Egami T. Atomic level stress // *Progress in Materials Science*. 2011. Vol. 56, Issue 6. Pp. 637–653. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.PMATSCI.2011.01.004>.
- [7] Tsai D.H. The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics // *Journal of Chemical Physics*. 1979. Vol. 70, Issue 3. Pp. 1375–1382. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.437577>.
- [8] Nartin R.M. First-Principles Calculation of Stress // *Physical Review Letters*. 1983. Vol. 50. Issue 9. Pp. 697–700. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.697>.
- [9] Nielsen O.N., Martin R.M. Quantum-mechanical theory of stress and force // *Physical Review B*. 1985. Vol. 32. Issue 6. Article number 3780. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.32.3780>.
- [10] Maranganti R., Sharma P. Revisiting quantum notions of stress // *Proceedings of the Royal Society. A*. 2010. Vol. 466 (2119). Pp. 2097–2116. DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.2009.0636>.
- [11] Maranganti R., Sharma P., Wheeler L. Quantum notions of stress // *Journal of Aerospace Engineering*. 2007. Vol. 20, Issue 1. Pp. 22–37. DOI: [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0893-1321\(2007\)20:1\(22\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0893-1321(2007)20:1(22)).
- [12] Shihara Y., Kohyama M., Ishibashi S. Ab initio local stress and its application to Al (111) surfaces // *Physical Review B*. 2010. Vol. 81, Issue 7. Article number 075441. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.075441>.
- [13] Wang H., Kohyama M., Tanaka S., Shihara Y. Ab initio local-energy and local-stress analysis of tensile behaviours of twin grain boundaries in Al and Cu // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2017. Vol. 25, Issue 1. Article number 015005. DOI: <http://doi.org/10.1088/1361-651X/25/1/015005>.
- [14] Cui Y., Chew H.B. A simple numerical approach for reconstructing the atomic stresses at grain boundaries from quantum-mechanical calculations // *Journal of Chemical Physics*. 2019. Vol. 150. Issue 14. Article number 144702. DOI: <http://doi.org/10.1063/1.5085061>.
- [15] Nicholson D.M., Ojha M., Egami T. First-principles local stress in crystalline and amorphous metals // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2013. Vol. 25, Number 43. Article number 435505. DOI: <http://doi.org/10.1088/0953-8984/25/43/435505>.
- [16] Koch C.T., Ozdol V.B., Van Aken P.A. An efficient, simple, and precise way to map strain with nanometer resolution in semiconductor devices // *Applied Physics Letters*. 2010. Vol. 96, Issue 9. Article number 091901. DOI: <http://doi.org/10.1063/1.3337090>.
- [17] Hytch M, Houdeller, Hue F., Snoeck E. Nano scale holographic interferometry for strain measurements in electronic devices // *Nature*. 2008. Vol. 453, Issue 7198. Pp. 1086–1089. DOI: <http://doi.org/10.1038/nature07049>.
- [18] Beche A., Rouviere J.L., Barnes J.P., Cooper D. Strain measurement at the nanoscale: Comparison between convergent beam electron diffraction, nano-beam electron diffraction, high resolution imaging and dark field electron holography // *Ultramicroscopy*. 2013. Vol. 131. Pp. 10–23. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2013.03.014>.
- [19] Legros M. In situ mechanical TEM: Seeing and measuring under stress with electrons // *Comptes Rendus Physique*. 2014. Vol. 15, Issues 2–3. Pp. 224–240. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2014.02.002>.
- [20] Li Y.-M., Zhang B. Cracking direction in graphene under mixed mode loading // *Engineering Fracture Mechanics*. 2022. Vol. 289. Article number 109434. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109434>.
- [21] Min B., Chen X., Li Ke, Wang Z. Multiscale study of enhancing the fracture properties of interfacial transition zone: Insights from molecular dynamics and finite element simulations // *Construction and Building Materials*. 2023. Vol. 409. Article number 133846. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.133846>.
- [22] Степанова Л.В., Белова О.Н. Идентификация коэффициентов интенсивности напряжений, T-напряжений и коэффициентов регулярных слагаемых высокого порядка в разложении Уильямса с помощью молекулярно-динамического моделирования // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Сер.: Механика*. 2023. № 2. С. 47–77. DOI: <http://doi.org/10.15593/perm.mech/2023.2.06>.
- [23] Мушанкова К.А., Степанова Л.В. Влияние слагаемых высокого порядка малости в решении, обобщающем подход М. Уильямса, учитывающем анизотропию материала // *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. 2023. Т. 29, № 2. С. 30–39. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-2-30-39>.
- [24] Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2022. Vol. 119. Article number 103298. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103298>. EDN: <https://elibrary.ru/wqtbw5>.
- [25] Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations // *Mechanics of Advanced Materials and Structures*. 2023. Vol. 30, Issue 19. Pp. 3862–3884. DOI: <http://doi.org/10.1080/15376494.2022.2084800>. EDN: <https://elibrary.ru/puctjd>.
- [26] Мушанкова К.А., Степанова Л.В. Молекулярно-динамическое моделирование полей напряжений в пластинах с центральной трещиной из материалов с гранцентрированной кубической решеткой // *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. 2021. Т. 27, № 4. С. 68–82. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-68-82>.

- [27] Nejati M., Ghouli S., Ayatollahi M.R. Crack tip asymptotic fields in anisotropic planes: Importance of higher order terms // *Applied Mathematical Modelling*. 2021. Vol. 91. Pp. 837–862. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apm.2020.09.025>.
- [28] Ayatollahi M.R., Nejati M., Ghouli S. The finite element over-deterministic method to calculate the coefficients of the crack tip asymptotic fields in anisotropic planes // *Engineering Fracture Mechanics*. 2020. Vol. 231. Article number 106982. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.106982>.
- [29] Sakha M., Nejati M., Aminzadeh A., Ghouli S., Saar M.O. On the validation of mixed-mode I/II crack growth theories for anisotropic rocks // *International Journal of Solids and Structures*. 2022. Vol. 241. Article number 111484. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2022.111484>.
- [30] Admal N.C., Tadmor E.B. A unified interpretation of stress in molecular systems // *Journal of Elasticity*. 2010. Vol. 100, No. 1–2. Pp. 63–143. DOI: <http://doi.org/10.1007/s10659-010-9249-6>.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2023-29-4-106-116

Submitted: 13.09.2023

Revised: 25.10.2023

Accepted: 05.12.2023

**K.A. Mushankova**

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: karinamushankova@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6081-1169>

**L.V. Stepanova**

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: stepanovalv2015@yandex.ru. ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-6693-3132>

## EXPERIENCE IN MODELING INCLINED CRACKS IN MATERIALS WITH CUBIC CRYSTAL STRUCTURE<sup>2</sup>

### ABSTRACT

In this work, a good coincidence of atomistic and continuum stress fields at the crack tip under mixed mode loading conditions in an anisotropic medium with cubic symmetry of elastic properties is revealed. The atomic stress distributions associated with the crack tip are obtained using the molecular dynamics method. Continuum distributions are obtained from the theoretical solution of the problem of determining the stress-strain state at the crack tip, based on the methods of the elasticity theory of anisotropic media and the subsequent decomposition of complex potentials by eigenfunctions. In the framework of a molecular dynamics computational experiment, a single-crystal face-centered copper at low temperature was considered in order to isolate the elastic mode of deformation of a single crystal, and the embedded atom potential was used. A distinctive feature of the conducted molecular dynamic modeling is the consideration of a crack that makes up various angles with planes of symmetry of the crystal. In the vicinity of the crack tip, points lying in annular regions at different distances from the crack tip and of different thickness were selected, and the dependences of the stress tensor components depending on the polar angle were plotted. A comparison of the angular dependencies obtained by atomistic calculation and using a theoretical solution showed their good consistency. It is found that the similarity of the angular dependences of the stress tensor components is observed for all the studied values of two angles: the angle between the axis of symmetry of the crystal lattice (in the plane of the plate) and the direction of the crack and the angle between the action of the tensile load and the crack line.

By virtue of this property of solutions, it can be concluded that solutions of continuous fracture mechanics can serve to describe stress fields at atomistic distances from the crack tip.

**Key words:** molecular dynamics method; atom implementation potential; cubic system; stress fields.

**Citation.** Mushankova K.A., Stepanova L.V. Experience in modeling inclined cracks in materials with cubic crystal structure. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2023, vol. 29, no. 4, pp. 106–116. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-106-116>. (In Russ.)

**Information about the conflict of interests:** authors and reviewers declare no conflict of interests.

<sup>2</sup>This work was supported by the Russian Science Foundation, grant number 21-11-00346).

© Mushankova K.A., Stepanova L.V., 2023

Karina A. Mushankova — Master Degree student of the Department of Mathematical Modeling in Mechanics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, 443086, Russian Federation.

Larisa V. Stepanova — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, associate professor, head of the Department of Mathematical Modeling in Mechanics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

## References

- [1] Cui Y., Chew H.B. Machine-Learning Prediction of Atomistic Stress along Grain Boundaries. *Acta Materialia*, 2022, vol. 222, Article number 117387. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117387>.
- [2] Li R., Chew H.B. Grain boundary traction signatures: Quantitative Predictors and Dislocation Emission. *Physical Review Letters*, 2016, vol. 117, issue 8, Article number 085502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.085502>.
- [3] Li R., Chew H.B. Grain boundary traction signatures: Quantifying the asymmetrical dislocation emission processes under tension and compression. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, vol. 103, pp. 142–154. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.03.009>.
- [4] Wu W.-P., Yao Z.-Z. Molecular dynamics simulation of stress distribution and microstructure evolution ahead of a growing crack in single crystal nickel. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2012, vol. 62, pp. 67–75. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.tafmec.2013.01.008>.
- [5] Yamakov V., Saether E., Phillips D.R., Glaessgen E.H. Molecular-dynamics simulation-based cohesive zone representation of intergranular fracture processes in aluminum. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2006, vol. 54, issue 9, pp. 1899–1928. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2006.03.004>.
- [6] Egami T. Atomic level stress. *Progress in Materials Science*, 2011, vol. 56, issue 6, pp. 637–653. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.PMATSCI.2011.01.004>.
- [7] Tsai D.H. The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 1979, vol. 70, issue 3, pp. 1375–1382. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.437577>.
- [8] Nielsen O.N., Martin R.M. First-Principles Calculation of Stress. *Physical Review Letters*, 1983, vol. 50, issue 9, pp. 697–700. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.697>.
- [9] Nielsen O.N., Martin R.M. Quantum-mechanical theory of stress and force. *Physical Review B*, 1985, vol. 32, issue 6, Article number 3780. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.32.3780>.
- [10] Maranganti R., Sharma P. Revisiting quantum notions of stress. *Proceedings of the Royal Society. A*, 2010, vol. 466 (2119), pp. 2097–2116. DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.2009.0636>.
- [11] Maranganti R., Sharma P., Wheeler L. Quantum notions of stress. *Journal Aerospace Engineering*, 2007, vol. 20, issue 1, pp. 22–37. DOI: [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0893-1321\(2007\)20:1\(22\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0893-1321(2007)20:1(22)).
- [12] Shihara Y., Kohyama M., Ishibashi S. Ab initio local stress and its application to Al (111) surfaces. *Physical Review B*, 2010, vol. 81, issue 7, Article number 075441. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.075441>.
- [13] Wang H., Kohyama M., Tanaka S., Shihara Y. Ab initio local-energy and local-stress analysis of tensile behaviours of tilt grain boundaries in Al and Cu. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2017, vol. 25, issue 1, Article number 015005. DOI: <http://doi.org/10.1088/1361-651X/25/1/015005>.
- [14] Cui Y., Chew H.B. A simple numerical approach for reconstructing the atomic stresses at grain boundaries from quantum-mechanical calculations. *Journal of Chemical Physics*, 2019, vol. 150, issue 14, Article number 144702. DOI: <http://doi.org/10.1063/1.5085061>.
- [15] Nicholson D.M., Ojha M., Egami T. First-principles local stress in crystalline and amorphous metals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, vol. 25, number 43, Article number 435505. DOI: <http://doi.org/10.1088/0953-8984/25/43/435505>.
- [16] Koch C.T., Ozdol V.B., Van Aken P.A. An efficient, simple, and precise way to map strain with nanometer resolution in semiconductor devices. *Applied Physics Letters*, 2010, vol. 96, issue 9, Article number 091901. DOI: <http://doi.org/10.1063/1.3337090>.
- [17] Hytch M., Houdeller, Hue F., Snoeck E. Nano scale holographic interferometry for strain measurements in electronic devices. *Nature*, 2008, vol. 453, issue 7198, pp. 1086–1089. DOI: <http://doi.org/10.1038/nature07049>.
- [18] Beche A., Rouviere J.L., Barnes J.P., Cooper D. Strain measurement at the nanoscale: Comparison between convergent beam electron diffraction, nano-beam electron diffraction, high resolution imaging and dark field electron holography. *Ultramicroscopy*, 2013, vol. 131, pp. 10–23. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ultramicro.2013.03.014>.
- [19] Legros M. In situ mechanical TEM: Seeing and measuring under stress with electrons. *Comptes Rendus Physique*, 2014, vol. 15, issues 2-3, pp. 224–240. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2014.02.002>.

- [20] Li Y.-M., Zhang B. Cracking direction in grapheme under mixed mode loading. *Engineering Fracture Mechanics*, 2022, vol. 289, Article number 109434. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109434>.
- [21] Min B., Chen X., Li Ke, Wang Z. Multiscale study of enhancing the fracture properties of interfacial transition zone: Insights from molecular dynamics and finite element simulations. *Construction and Building Materials*, 2023, vol. 409, Article number 133846. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.133846>.
- [22] Stepanova L.V., Belova O.N. Identification of stress intensity factors, T-stresses and higher-order coefficients of regular terms in the Williams series expansion through molecular dynamics simulations. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2023, no. 2, pp. 47–77. DOI: <http://doi.org/10.15593/perm.mech/2023.2.06>. (In Russ.)
- [23] Mushankova K.A., Stepanova L.V. Influence of high-order terms in the solution generalizing the approach of M. Williams, taking into account the anisotropy of the material. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2023, vol. 29, no. 2, pp. 30–40. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-2-30-40>. (In Russ.)
- [24] Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2022, vol. 119, Article number 103298. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103298>. EDN: <https://elibrary.ru/wqtbws>.
- [25] Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 2023, vol. 30, issue 19, pp. 3862–3884. DOI: <http://doi.org/10.1080/15376494.2022.2084800>. EDN: <https://elibrary.ru/puctjd>.
- [26] Mushankova K.A., Stepanova L.V. Molecular dynamic modeling of stress fields in plates with a central crack made of materials with a face-centered cubic lattice. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2021, vol. 27, no. 4, pp. 68–82. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-68-82>. (In Russ.)
- [27] Nejati M., Ghouli S., Ayatollahi M.R. Crack tip asymptotic fields in anisotropic planes: Importance of higher order terms. *Applied Mathematical Modelling*, 2021, vol. 91, pp. 837–862. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apm.2020.09.025>.
- [28] Ayatollahi M.R., Nejati M., Ghouli S. The finite element over-deterministic method to calculate the coefficients of the crack tip asymptotic fields in anisotropic planes. *Engineering Fracture Mechanics*, 2020, vol. 231, Article number 106982. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.106982>.
- [29] Sakha M., Nejati M., Aminzadeh A., Ghouli S., Saar M.O. On the validation of mixed-mode I/II crack growth theories for anisotropic rocks. *International Journal of Solids and Structures*, 2022, vol. 241, Article number 111484. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2022.111484>.
- [30] Admal N.C., Tadmor E.B. A unified interpretation of stress in molecular systems. *Journal of Elasticity*, 2010, vol. 100, no. 1–2, pp. 63–143. DOI: <http://doi.org/10.1007/s10659-010-9249-6>.