

УДК 539.3, 004.9, 519.8

DOI: 10.32326/1814-9146-2024-86-1-15-25

АТОМИСТИЧЕСКОЕ И КОНТИНУАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ У ВЕРШИНЫ ТРЕЩИНЫ В АНИЗОТРОПНЫХ СРЕДАХ С КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИЕЙ*

© 2024 г.

Степанова Л.В., Мушанкова К.А.

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, Самара, Российская Федерация*

stepanova.lv@ssau.ru, mushankova.ka@ssau.ru

Поступила в редакцию 03.09.2023

Проведен сравнительный анализ напряжений, ассоциированных с вершиной трещины в анизотропной среде с кубической симметрией упругих свойств, в условиях смешанного нагружения посредством двух различных подходов: атомистического и континуального. Атомистический подход основан на применении молекулярно-динамического метода, выполняемого в открытом пакете Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. Континуальный подход базируется на классической теории упругости анизотропных сред, в рамках которой механические поля, ассоциированные с вершиной трещины, представляются с помощью рядов, обобщающих на случай анизотропных сред известное представление М. Уильямса. С помощью метода молекулярной динамики проведена серия расчетов нагружения монокристаллических медных и алюминиевых пластин с гранецентрированной кристаллической решеткой, ослабленных центральной трещиной, с применением потенциала внедренного атома. Молекулярно-динамическое моделирование нацелено на определение атомистических напряжений и деформаций вблизи вершины трещины. Вычисленные атомистические напряжения сравнивались с полем напряжений, определяемых континуальной теорией упругости анизотропных сред для кристаллических решеток с кубической симметрией упругих свойств. Сравнительный анализ проводился для угловых зависимостей компонент тензора напряжения и деформации на различных выбранных расстояниях от кончика трещины для всего интервала смешанных форм деформирования: от идеального нормального растяжения до форм, близких к идеальному поперечному сдвигу. Установлено, что поля, найденные на основе двух принципиально различных подходов (дискретного и континуального), полностью согласуются между собой. Продемонстрировано, что математические методы континуальной механики разрушения могут быть применены для описания полей напряжений, деформаций и перемещений на атомистическом уровне.

Ключевые слова: поля у вершины трещины, анизотропная среда, кубическая симметрия упругих свойств, метод молекулярной динамики, асимптотическое решение механики разрушения.

* Выполнено при поддержке РФФ (проект №21-11-00346).

Введение

В машиностроении, материаловедении и многих других сферах широко используются теории, результаты и решения классической линейной механики упругого разрушения на макроскопическом уровне, где справедливы положения и гипотезы механики сплошных сред. Однако очевидно, что макроскопическое поведение деформируемых тел обусловлено строением кристаллической решетки и ее наноскопическими параметрами. Вопросы, связанные с возможностью применения хорошо развитого математического аппарата механики разрушения на атомистическом и молекулярном уровнях, становятся более значимыми в последнее время [1–15]. В статьях [1–5] вычисляются параметры классической механики разрушения на основе молекулярно-динамических (МД) расчетов. В [6] отмечается, что инициирование роста трещин в хрупких материалах обычно изучается с использованием коэффициента интенсивности напряжений (КИН). При атомистическом моделировании «локальный» критический КИН обычно определяется косвенно путем соотнесения его с «глобальной» энергетически рассчитанной критической скоростью выделения энергии. В [6] был реализован метод расчета критического КИН по полю атомистических напряжений вблизи вершины. Авторы [6] показывают, что предлагаемый ими метод имеет общую применимость для измерения критического КИН непосредственно с использованием поля напряжений вблизи вершины для любого аморфного изотропного твердого тела в атомистическом масштабе независимо от количества типов составляющих элементов. Цель исследования [7] состоит из трех частей: 1) определить обоснованность применения основанной на идее континуума линейной механики упругого разрушения для исследования процессов разрушения на дискретном атомном уровне в аморфных материалах, таких как полимеры; 2) количественно оценить вклад энтропийных эффектов в J -интеграл на наноуровне из-за теплового движения атомов; 3) продемонстрировать, что атомистический J -интеграл может быть применен для извлечения закона когезионного сцепления-разделения на наноразмерном надрезе в качестве свойства материала в полимере при соблюдении определенных критериев моделирования. В [8] дается обзор различных подходов к моделированию и прогнозированию распространения трещин в квазихрупких материалах, указываются их достоинства, недостатки и взаимодополняемость. В последние десятилетия был использован дополнительный подход, основанный на дискретности, ставший основным подходом и в области вычислительной физики, и в области вычислительной механики. В [9] кратко описывается текущее состояние этой современной технологии моделирования наряду с ключевыми вычислительными методами, такими как МД и комбинированные методы конечных дискретных элементов. В [10] подчеркивается, что появление трещин и повреждений, обусловленных внутренней хрупкостью стекол из аморфного оксида, является важнейшей проблемой при ежедневном использовании изделий из стекла. В обзоре [10] также рассматриваются примеры применения классического моделирования методами МД и реактивного моделирования для исследования эволюции трещин и повреждений в стекле и стеклокерамике. Авторы [11] предлагают новое описание разрушения на атомистическом уровне в терминах КИН. В разработанной теории КИН и межатомный потенциал Морзе связываются для описания разрушения вблизи кончика трещины при ее росте в зигзагообразном направлении. Миниатюризация механических конструкций обеспечивает отличные эксплуатационные характеристики устройства, в то же время создавая проблемы разрушения на наноуров-

не [12]. Вследствие этого возникает вопрос: применима ли классическая теория разрушения в таком малом масштабе и каков ее нижний предел? В [12] путем проведения атомистического моделирования исследуется применимый диапазон расстояний от вершины трещины для имеющихся моделей асимптотического поведения напряжений вблизи вершины трещины и нижняя оценка длины трещины для критерия разрушения. Исследование [13] также посвящено возможности использования подходов и гипотез континуальной механики разрушения на молекулярном уровне. Способность характеризовать разрушение в атомном масштабе с помощью КИН дает возможность исследовать химические эффекты, добавление того или иного микроструктурного компонента. В [13] представлен новый численный метод определения КИН с помощью МД моделирования. В [14] описан метод вычисления критических скоростей выделения энергии для распространения трещины в атомистических моделях и его применение к моделированию разрушения кристалла никеля. Главной целью в [15] является анализ углов направления распространения трещин в смешанном режиме МД методом и исследование обоснованности критериев роста трещин, базирующихся на континуальной линейной механике упругого разрушения. Однако, несмотря на большое количество работ [16–21], посвященных этому кругу вопросов, тема применимости положений механики разрушения на наноскопическом масштабе остается мало изученной и требует дополнительного и глубокого обоснования. Этим вопросам и посвящена настоящая статья.

1. Аналитическое решение для полей напряжений анизотропных материалов

Аналитическое представление компонент тензора напряжений для ортотропного материала (в частном случае для материала с кубической симметрией) подробно описано в статье [16] и имеет форму:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = 2 \operatorname{Re} \left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{i^{(n+1)^2}}{\mu_1 - \mu_2} r^{n/2-1} \times \right. \\ \left. \times \begin{pmatrix} \mu_2^2 \mu_1^{((-1)^{n+1}+1)/2} (\cos \theta + \mu_2 \sin \theta)^{n/2-1} - \mu_1^2 \mu_2^{((-1)^{n+1}+1)/2} (\cos \theta + \mu_1 \sin \theta)^{n/2-1} \\ \mu_1^{((-1)^{n+1}+1)/2} (\cos \theta + \mu_2 \sin \theta)^{n/2-1} - \mu_2^{((-1)^{n+1}+1)/2} (\cos \theta + \mu_1 \sin \theta)^{n/2-1} \\ - (\mu_2 \mu_1^{((-1)^{n+1}+1)/2} (\cos \theta + \mu_2 \sin \theta)^{n/2-1} - \mu_1 \mu_2^{((-1)^{n+1}+1)/2} (\cos \theta + \mu_1 \sin \theta)^{n/2-1}) \end{pmatrix} \right) + \\ + 2 \operatorname{Re} \left(\sum_{n=1}^{\infty} B_n \frac{i^{(n+1)^2}}{\mu_1 - \mu_2} r^{n/2-1} \times \right. \\ \left. \times \begin{pmatrix} \mu_2^2 \mu_1^{((-1)^n+1)/2} (\cos \theta + \mu_2 \sin \theta)^{n/2-1} - \mu_1^2 \mu_2^{((-1)^n+1)/2} (\cos \theta + \mu_1 \sin \theta)^{n/2-1} \\ \mu_1^{((-1)^n+1)/2} (\cos \theta + \mu_2 \sin \theta)^{n/2-1} - \mu_2^{((-1)^n+1)/2} (\cos \theta + \mu_1 \sin \theta)^{n/2-1} \\ - (\mu_2 \mu_1^{((-1)^n+1)/2} (\cos \theta + \mu_2 \sin \theta)^{n/2-1} - \mu_1 \mu_2^{((-1)^n+1)/2} (\cos \theta + \mu_1 \sin \theta)^{n/2-1}) \end{pmatrix} \right),$$

где μ_1, μ_2 – корни характеристического уравнения, полученного путем решения уравнения совместности через общее решение в виде комплексного потенциала; r, θ – полярные координаты с полюсом в вершине трещины; A_n, B_n – амплитудные коэффициенты асимптотических полей трещины анизотропного материала. Амплитудные множители полей напряжений в бесконечной анизотропной пластине с центральной трещиной длиной $2a$, находящейся под углом α , подвергнутой одноосному нагружению, представляются соотношениями:

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

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

$$B_2 = \frac{\sigma \operatorname{Re}(\mu_1 + \mu_2)}{2 \operatorname{Im}(\mu_1 \mu_2)} (\sin \alpha \cos \alpha - \lambda),$$

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

$$A_{2n+2} = B_{2n+2} = 0,$$

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

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

$$n = 1, 2, 3, \dots,$$

где λ – постоянный член, отвечающий за вращение тела как абсолютно твердого (рассмотрен случай $\lambda = 0$); σ – приложенная растягивающая нагрузка.

2. Молекулярно-динамический расчет напряжений на атомистическом уровне. Детали и результаты вычислений

Первым шагом МД вычислительного эксперимента является определение компонент тензора упругих модулей рассматриваемых материалов. В рамках МД расчетов для различных видов нагружения кубика из монокристаллических меди и алюминия с параметрами решетки 3,615 и 3,986 Å соответственно, описываемых файлами потенциалов погруженного атома Cu_u3.eam и Al_jnr.eam, была вычислена потенциальная энергия образца и далее в соответствии с процедурой, подробно описанной в [17], определены компоненты тензора упругих модулей. В результате были получены тензоры упругих модулей для меди и алюминия.

С помощью тензоров были найдены характеристические числа для рассматриваемых материалов μ_1 и μ_2 , необходимые для построения аналитического решения, по формулам, приведенным в [16]. Поскольку оба исследуемых материала обладают кубической симметрией, вид характеристического уравнения, необходимого для нахождения μ_1, μ_2 , полученного путем решения уравнения совместности через общее решение в виде комплексного потенциала, упрощается до биквадратного уравнения, которое можно решить, не применяя упрощение, описанное в [16]. Таким образом, для меди $\mu_1 = 0,7087 + 0,7055i$, $\mu_2 = -0,7087 + 0,7055i$, для алюминия $\mu_1 =$

$= 0,6897 + 0,7241i$, $\mu_2 = -0,6897 + 0,7241i$. Пространственные визуализации упругих свойств меди и алюминия, а именно модуля Юнга и максимальных значений коэффициента Пуассона, построенные с использованием инструмента визуализации и анализа упругой анизотропии VELAS [18], приведены на рис. 1, 2.

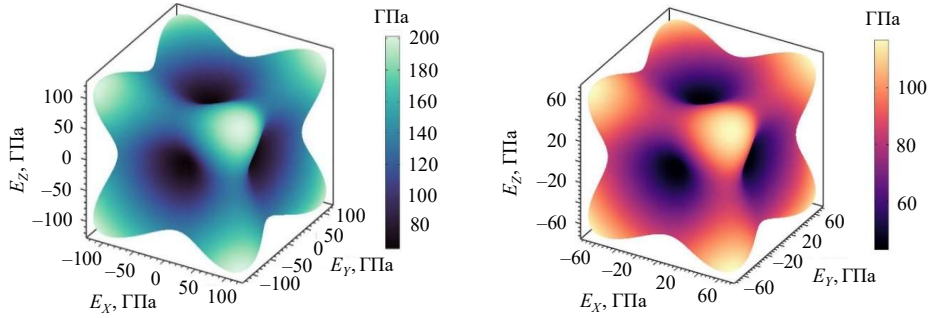


Рис. 1. Пространственная визуализация модуля Юнга меди (слева) и алюминия (справа)

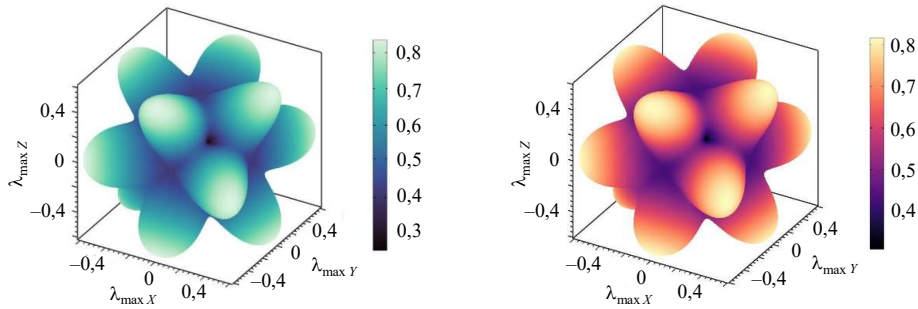


Рис. 2. Пространственная визуализация максимальных значений коэффициента Пуассона меди (слева) и алюминия (справа)

В программном пакете Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) было проведено МД моделирование полей напряжений пластины, ослабленной центральной трещиной. Создавался бокс размерами $100 \times 100 \times 3$ в единицах параметра решетки, который включал в себя 120 000 атомов. Дефект моделировался за счет исключения взаимодействий между группами атомов. Система приводилась в равновесное состояние путем минимизации полной энергии системы. Аналитическое решение приведено для трещины, находящейся под углом α , но при моделировании в программном пакете LAMMPS удобнее задавать смешанность нагружения путем приложения к пластинке с горизонтальной трещиной нормальной и тангенциальной нагрузок. Рассмотрим случаи, когда параметр смешанности нагружения $M^e = 0,25; 0,5; 0,75; 1,0$. Выражение, связывающее значение параметра смешанности нагружения M^e и величину угла наклона трещины α , имеет вид:

$$M^e = \frac{2}{\pi} \arctg \left| \frac{\sigma_{22}}{\sigma_{12}} \right| = \frac{2}{\pi} \arctg |\tg \alpha| = \frac{2\alpha}{\pi}.$$

Командой fix prt к пластинке прикладывались нормальный отрыв σ и сдвиговая нагрузка σ_τ , определяемая соотношением $\sigma_\tau = \sigma/\tg(M^e\pi/2)$. Результаты МД моделирования визуализировались в программном пакете OVITO, распределения напряжений в монокристаллической медной пластине при нормальном отрыве на временных шагах 3, 4 и 5 пс представлены на рис. 3–5.

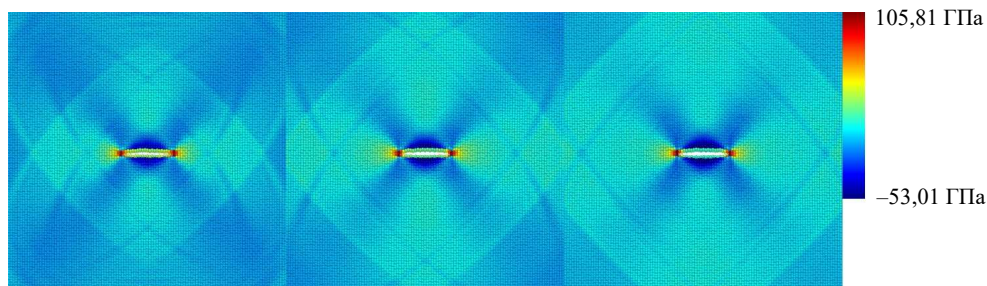


Рис. 3. Распределение нормальной компоненты тензора напряжений σ_{11} на временных шагах 3, 4, 5 пс (слева направо)

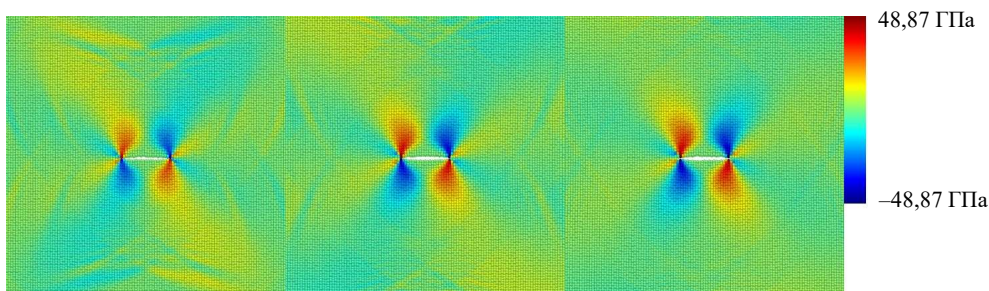


Рис. 4. Распределение нормальной компоненты тензора напряжений σ_{12} на временных шагах 3, 4, 5 пс (слева направо)

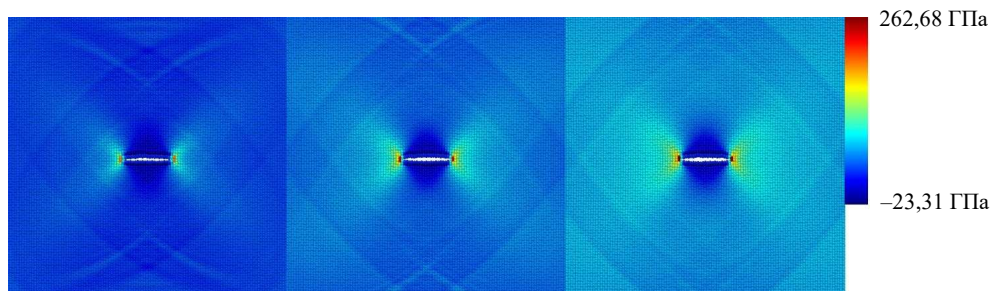


Рис. 5. Распределение нормальной компоненты тензора напряжений σ_{22} на временных шагах 3, 4, 5 пс (слева направо)

3. Сравнительный анализ полей напряжений, полученных методом молекулярной динамики и на базе теории упругости анизотропных сред

Изменения компонент напряжений в зависимости от полярного угла, найденные посредством метода молекулярной динамики и аналитического решения задачи, для различных типичных значений параметра смешанности нагружения изображены на рис. 6. Результаты при приложении нормальной нагрузки σ в 30 ГПа, касательной σ_τ в 72,43 ГПа, то есть при параметре смешанности нагружения $M^e = 0,25$, на временном шаге 2,2 пс приведены на рис. 6а; при $\sigma = \sigma_\tau = 50$ ГПа, $M^e = 0,5$ на временном шаге 3,8 пс – на рис. 6б; при $\sigma = 80$ ГПа, $\sigma_\tau = 33,14$ ГПа, $M^e = 0,75$ на временном шаге 5,1 пс – на рис. 6в; при $\sigma = 100$ ГПа, $\sigma_\tau = 0$, $M^e = 1,0$ на временном шаге 5,3 пс приведены на рис. 6г. Сплошные кривые показывают аналитические решения задачи о растяжении пластины с центральной трещиной, синие точки – МД решения.

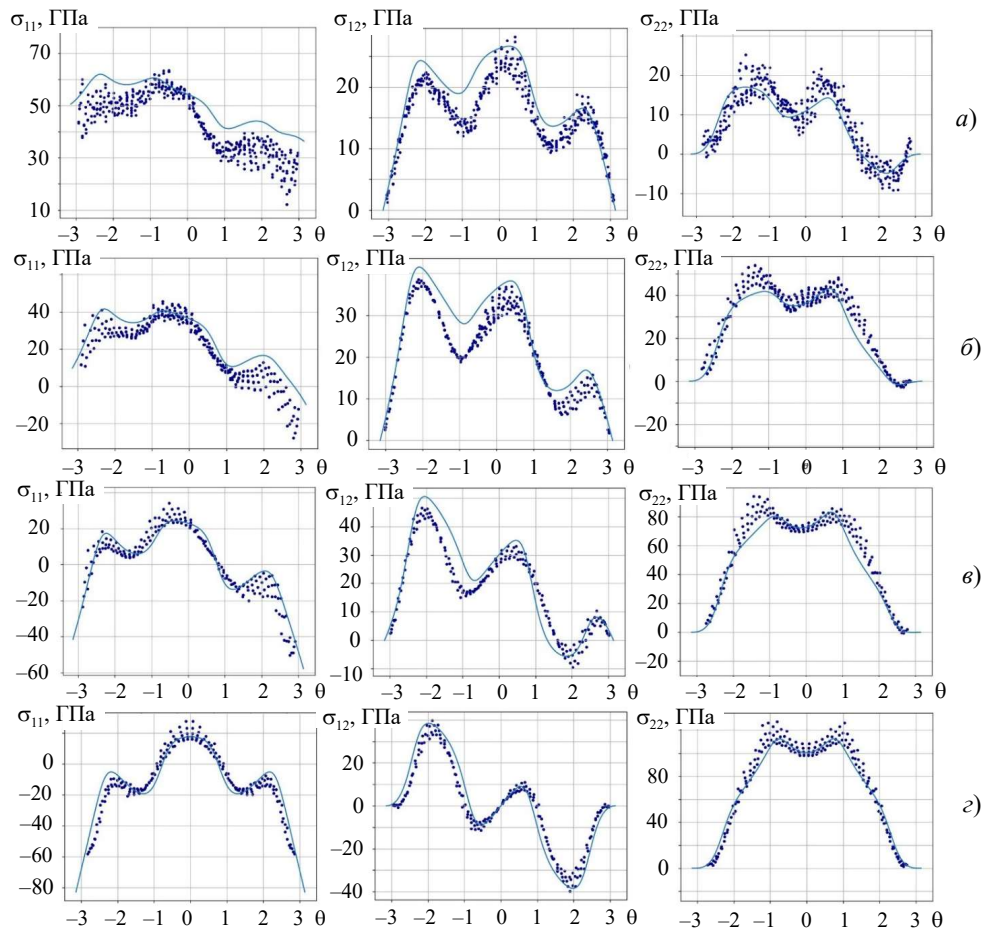


Рис. 6. Сравнение угловых распределений компонент напряжений в медной пластине

Из рис. 6 видно, что молекулярно-атомистическое решение, изображенное точками, для всех рассмотренных значений параметра смешанности нагружения является хорошим приближением аналитического решения, показанного сплошной линией, в котором сохранены двадцать пять слагаемых в разложении. Таким образом, можно говорить о справедливости решений континуальной механики разрушения на наноскопическом уровне и о потенциальной возможности сращивания решений, работающих на различных масштабных уровнях, посредством обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений [19–21].

Заключение

Выявлено, что механические поля, ассоциированные с вершиной трещины в линейно упругом анизотропном материале с кубической симметрией упругих свойств, найденные на основе двух принципиально различных подходов (дискретного и непрерывного), хорошо согласуются друг с другом. Ясно видно, что и атомистические напряжения, и атомистические деформации могут быть результативно связаны с соответствующими величинами континуальной теории. Продемонстрировано, что математические методы и результаты классической континуальной механики разрушения могут быть использованы для представления полей напряжений, деформаций

и перемещений на атомарном уровне. Следовательно, теория сплошных сред может быть применена к задачам механики разрушения на наноскопическом уровне.

Список литературы

1. Singh S.K., Parashar A. Atomistic simulations to study crack tip behaviour in multi-elemental alloys. *Engineering Fracture Mechanics*. 2021. Vol. 243. Article No 107536. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2021.107536>.
2. Lakshminpathy T., Steinmann P., Bitzek E. LEFM is agnostic to geometrical nonlinearities arising at atomistic crack tips. *Forces in Mechanics*. 2022. Vol. 9. Article No 100127. <https://doi.org/10.1016/j.finmec.2022.100127>.
3. 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 No 103298. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103298>.
4. 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. Iss. 19. P. 3862–3884. <https://doi.org/10.1080/15376494.2022.2084800>.
5. 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 ПНИПУ. Механика*. 2023. №2. С. 47–77. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2023.2.06>.
6. Singh A., Singh G. A localized stress field approach for calculating the critical stress intensity factor for an isotropic solid at atomistic scale. *Mechanics of Materials*. 2023. Vol. 181. Article No 104632. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2023.104632>.
7. Sohali T., Roy S. An investigation of the validity of LEFM at the nanoscale in amorphous materials using the atomistic J-integral including entropic effect. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2023. Vol. 125. Article No 103913. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2023.103913>.
8. Borst R. Fracture and damage in quasi-brittle materials: A comparison of approaches. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2022. Vol. 122. Article No 103652. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103652>.
9. Munjiza A., Rougier E., Knight E.E., Lei Z. Discrete and combined finite discrete element methods for computational mechanics of discontinua. *Comprehensive Structural Integrity*. 2023. Vol. 3. P. 408–428. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822944-6.00033-5>.
10. Urata S., Hirobe S., Oguni K., Li S. Atomistic to continuum simulations of fracture and damage evolutions in oxide glass and glass-ceramic materials: A critical review. *Journal of Non-Crystalline Solids: X*. 2022. Vol. 15. Article No 100102. <https://doi.org/10.1016/j.nocx.2022.100102>.
11. Huang K., Wu J., Yin Y., Xu W. Atomistic-continuum theory of graphene fracture for opening mode crack. *International Journal of Solids and Structures*. 2023. Vol. 268. Article No 112172. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2023.112172>.
12. Wang J., Ye X., Yang X., Liu M., Li X. The applicability and the low of the classical fracture theory at nanoscale: The fracture of graphene. *Engineering Fracture Mechanics*. 2023. Vol. 284. Article No 109282. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109282>.
13. Wilson M.A., Grutzik S.J., Chandross M. Continuum stress intensity factors from atomistic fracture simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2019. Vol. 354. P. 732–749. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.05.050>.
14. Xu G.Q., Demkowicz M.J. Computing critical energy release rate for fracture in atomistic simulations. *Computational Materials Science*. 2020. Vol. 181. Article No 109738. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109738>.
15. Stepanova L., Bronnikov S. A computational study of the mixed-mode crack behavior by molecular dynamics method and the multi-parameter crack field description of classical fracture mechanics. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2020. Vol. 109. Article No 102691. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2020.102691>.
16. Nejati M., Ghoulai S., Ayatollahi M.R. Crack tip asymptotic fields in anisotropic planes:

Importance of higher order terms. *Applied Mathematical Modelling*. 2021. Vol. 91. P. 837–862. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2020.09.025>.

17. Мушанкова К.А., Степанова Л.В. Молекулярно-динамическое моделирование полей напряжений в пластине с центральной трещиной из материалов с гранецентрированной кубической решеткой. *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. 2021. Т. 27. №4. С. 68–82. <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-68-82>.

18. Ran Z., Zou C., Wang H. VELAS: An open-source toolbox for visualization and analysis of elastic anisotropy. *Computer Physics Communications*. 2022. Vol. 283. Article No 108540. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108540>.

19. Ayatollahi M.R., Nejati M., Ghoulis. The finite element over-deterministic method to calculate the coefficients of crack tip asymptotic fields in anisotropic planes. *Engineering Fracture Mechanics*. 2020. Vol. 231. Article No 106982. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.106982>.

20. Bahrami B., Talebi H., Ayatollahi M.R., Khosravani M.R. Artificial neural network in prediction of mixed mode I/II fracture load. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2023. Vol. 248. Article No 108214. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2023.108214>.

21. Melching D., Breitbarth E. Advanced crack tip characterization using conjugate work integrals. *International Journal of Fatigue*. 2023. Vol. 169. Article No 107501. <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2023.107501>.

References

1. Singh S.K., Parashar A. Atomistic simulations to study crack tip behaviour in multi-elemental alloys. *Eng. Fract. Mech.* 2021. Vol. 243. Article No 107536. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2021.107536>.

2. Lakshminpathy T., Steinmann P., Bitzek E. LFM is agnostic to geometrical nonlinearities arising at atomistic crack tips. *Forces in Mechanics*. 2022. Vol. 9. Article No 100127. <https://doi.org/10.1016/j.finmec.2022.100127>.

3. 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. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2022. Vol. 119. Article No 103298. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103298>.

4. 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. Iss. 19. P. 3862–3884. <https://doi.org/10.1080/15376494.2022.2084800>.

5. Stepanova L.V., Belova O.N. Identifikatsiya koeffitsientov intensivnosti napryazheniy, T-napryazheniy i koeffitsientov regulyarnykh slagaemykh vysokogo poryadka v razlozhenii Wilyamsa s pomoshchyu molekulyarno-dinamicheskogo modelirovaniya [Identification of stress intensity factors, T-stresses and higher-order coefficients of regular terms in the Williams series expansion through molecular dynamics simulations]. *Vestnik Permskogo natsionalnogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika [PNRPU Mechanics Bulletin]*. 2023. No 2. P. 47–77 (In Russian).

6. Singh A., Singh G. A localized stress field approach for calculating the critical stress intensity factor for an isotropic solid at atomistic scale. *Mech. Mater.* 2023. Vol. 181. Article No 104632. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2023.104632>.

7. Sohali T., Roy S. An investigation of the validity of LFM at the nanoscale in amorphous materials using the atomistic J-integral including entropic effect. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2023. Vol. 125. Article No 103913. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2023.103913>.

8. Borst R. Fracture and damage in quasi-brittle materials: A comparison of approaches. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2022. Vol. 122. Article No 103652. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103652>.

9. Munjiza A., Rougier E., Knight E.E., Lei Z. Discrete and combined finite discrete element methods for computational mechanics of discontinua. *Comprehensive Structural Integrity*. 2023. Vol. 3. P. 408–428. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822944-6.00033-5>.

10. Urata S., Hirobe S., Oguni K., Li S. Atomistic to continuum simulations of fracture and damage evolutions in oxide glass and glass-ceramic materials: A critical review. *J. Non Cryst. Solids: X*. 2022. Vol. 15. Article No 100102. <https://doi.org/10.1016/j.nocx.2022.100102>.

11. Huang K., Wu J., Yin Y., Xu W. Atomistic-continuum theory of graphene fracture for opening mode crack. *Int. J. Solids and Struct.* 2023. Vol. 268. Article No 112172. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2023.112172>.
12. Wang J., Ye X., Yang X., Liu M., Li X. The applicability and the low of the classical fracture theory at nanoscale: The fracture of graphene. *Eng. Fract. Mech.* 2023. Vol. 284. Article No 109282. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109282>.
13. Wilson M.A., Grutzik S.J., Chandross M. Continuum stress intensity factors from atomistic fracture simulations. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 2019. Vol. 354. P. 732–749. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.05.050>.
14. Xu G.Q., Demkowicz M.J. Computing critical energy release rate for fracture in atomistic simulations. *Comput. Mater. Sci.* 2020. Vol. 181. Article No 109738. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109738>.
15. Stepanova L., Bronnikov S. A computational study of the mixed-mode crack behavior by molecular dynamics method and the multi-parameter crack field description of classical fracture mechanics. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2020. Vol. 109. Article No 102691. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2020.102691>.
16. Nejati M., Ghouli S., Ayatollahi M.R. Crack tip asymptotic fields in anisotropic planes: Importance of higher order terms. *Appl. Math. Model.* 2021. Vol. 91. P. 837–862. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2020.09.025>.
17. Mushankova K.A., Stepanova L.V. Molekulyarno-dinamicheskoe modelirovanie poley napryazheniy v plastine s tsentralnoy treshchinoy iz materialov s granetsentrirovannoy kubicheskoy reshetkoy [Molecular dynamic modeling of stress fields in plates with a central crack made of materials with a face-centered cubic lattice]. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvenno-nauchnaya seriya [Vestnik of Samara University. Natural Science Series]*. 2021. Vol. 27. No 4. P. 68–82 (In Russian).
18. Ran Z., Zou C., Wang H. VELAS: An open-source toolbox for visualization and analysis of elastic anisotropy. *Comput. Phys. Commun.* 2022. Vol. 283. Article No 108540. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108540>.
19. Ayatollahi M.R., Nejati M., Ghouli S. The finite element over-deterministic method to calculate the coefficients of crack tip asymptotic fields in anisotropic planes. *Eng. Fract. Mech.* 2020. Vol. 231. Article No 106982. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.106982>.
20. Bahrami B., Talebi H., Ayatollahi M.R., Khosravani M.R. Artificial neural network in prediction of mixed mode I/II fracture load. *Int. J. Mech. Sci.* 2023. Vol. 248. Article No 108214. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2023.108214>.
21. Melching D., Breitbarth E. Advanced crack tip characterization using conjugate work integrals. *Int. J. Fatigue.* 2023. Vol. 169. Article No 107501. <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2023.107501>.

**ATOMISTIC AND CONTINUAL DETERMINATION OF STRESS FIELDS
AT A CRACK TIP IN ANISOTROPIC ENVIRONMENT WITH CUBIC SYSTEM***

Stepanova L.V., Mushankova K.A.

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

stepanova.lv@ssau.ru, mushankova.ka@ssau.ru

Received by the Editor 2023/09/03

The article presents a comparative analysis of stresses associated with a crack tip in an anisotropic medium with cubic symmetry of elastic properties under mixed mode loading conditions, using two different approaches: atomistic and continuum approaches. The atomistic approach is based on the use of the molecular dynamics method implemented in the open source Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS). The continuum approach is based on the classical theory of elasticity of anisotropic media, in which the mechanical fields

*The research was supported by the Russian Science Foundation (grant No 21-11-00346).

associated with the crack tip are represented using series that generalize the well-known representation of M. Williams to the case of anisotropic media. Using the method of molecular dynamics, a large series of calculations of loading of single-crystal copper and aluminum plates with a face-centered crystal lattice, weakened by a central crack, was carried out using the embedded atom potential (EAM). Molecular dynamics modeling is aimed at determining atomistic stresses and strains near the crack tip. The calculated atomistic stresses were compared with the stress field determined by the continuum theory of elasticity of anisotropic media for crystal lattices with cubic symmetry of elastic properties. A comparative analysis was carried out for the angular dependences of the stress and strain tensor components at different distances from the crack tip for the entire range of mixed strain modes: from perfect normal tension to loadings close to perfect transverse shear. It is established that the fields found on the basis of two fundamentally different approaches (discrete and continuum) are fully consistent with each other. It is demonstrated that the mathematical methods of continuum fracture mechanics can be used to describe stress, strain, and displacement fields at the atomistic level.

Keywords: fields near the crack tip, anisotropic medium, cubic symmetry of elastic properties, molecular dynamics method, asymptotic solution of fracture mechanics.