

МЕХАНИКА ГОРНЫХ ПОРОД

УДК 539.37:549.8

DOI:10.7242/echo.2025.4.3

ОПИСАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ГАЛИТА С ПОЗИЦИИ ФИЗИЧЕСКОГО ПОДХОДА ПОСТРОЕНИЯ ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ СООТНОШЕНИЙ

А.С. Соколов

Горный институт УрО РАН, г. Пермь

Аннотация: В работе представлена физически-ориентированная математическая модель для описания упругопластического деформирования монокристаллов галита (каменной соли). Модель основана на дислокационном механизме и учитывает кристаллографические системы скольжения, характерные для гранцентрированной кубической решетки, в частности, доминирующую систему $\{110\}\langle 1-10\rangle$ и второстепенные $\{100\}\langle 011\rangle$ и $\{111\}\langle 1-10\rangle$. Определяющие соотношения формулируются в скоростной форме с использованием индифферентной меры скорости деформации и учитывают аддитивное разложение деформации на упругую и пластическую составляющие. Пластическое течение описывается с помощью упруговязкопластического соотношения для скоростей сдвига по системам скольжения. Проведено численное моделирование одноосного сжатия поликристаллического образца, состоящего из 100 кристаллитов, которое продемонстрировало адекватное описание начальной стадии пластического деформирования и влияние кристаллографической анизотропии. В работе также анализируются ключевые недостатки физически-ориентированного подхода, включая высокую вычислительную сложность, чувствительность к большому числу физических параметров и трудности верификации и учета макроэффектов.

Ключевые слова: каменная соль, монокристалл, поликристалл, дислокационное скольжение, система скольжения, пластическое деформирование, математическая модель.

Введение

Галит или каменная соль является одной из основных соляных пород Верхнекамского месторождения калийно-магниевых солей (ВКМКС), пласты которой слагают водозащитную толщу (ВЗТ). Прочностные характеристики и особенности поведения такого материала на ВКМКС позволяют решать задачу обеспечения защиты рудников от затопления [1].

Для построения определяющих соотношений, закладываемых в математическую модель, существует несколько способов. Одним из немаловажных и хорошо устоявшихся подходов является макрофеноменологический, который позволяет набрать статистическую основу на лабораторных экспериментах и провести интерполяцию полученных зависимостей с дальнейшим её масштабированием. В основу другого подхода закладывается описание физических процессов, происходящих непосредственно внутри самого образца в условиях нагружения, и такой подход называется физически-ориентированным. Его описание основывается на введении механизмов деформирования, являющихся носителями деформации на рассматриваемом масштабном уровне.

Данная работа посвящена построению математической модели галита с использованием физически-ориентированного подхода и описанием одного из принятых физических механизмов деформирования.

Описание процесса деформирования

Во время одноосного нагружения образца соляной породы возникает множество физических процессов, происходящих внутри него, начиная с уплотнения, упругого и пластического деформирования, и заканчивая разрушением. На этапе уплотнения происходит поджатие кристаллов в те области, которые являются свободными. В области упругого деформирования накапливается энергия для преодоления внутркристалличе-

ских и межкристаллических связей. Пластическое деформирование сопровождается необратимой деформацией, которая может быть описана за счёт дислокационного механизма (ДМ) и зернограницного скольжения (ЗГС), что приводит к образованию микро- и мезотрещин, сопоставимых с размерами кристаллитов. На последнем этапе происходит слияние мезотрещин в единую сеть и образование макротрещин, что приводит к потере несущей способности образца.

Описание пластического деформирования каменной соли с использованием дислокационного механизма является допустимым, так как галит относится к материалам, которые обладают гранецентрированной кубической кристаллической решеткой. Дислокацией называется дефект кристаллической решетки, который представляется в виде вставленной полуплоскости. На рис. 1 представлен пример идеальной кристаллической структуры и структуры, содержащей дислокацию.

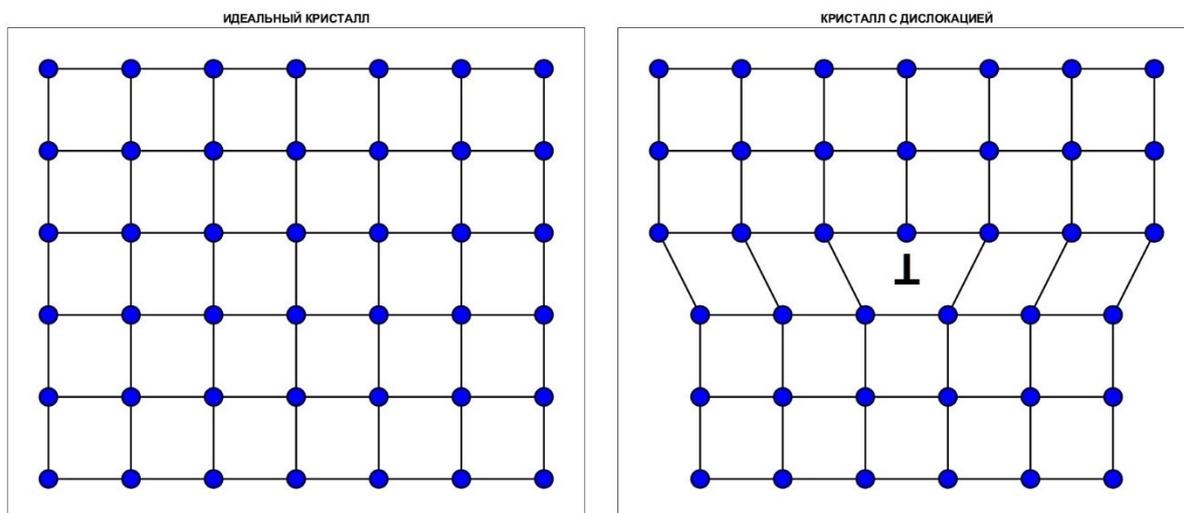


Рис. 1. Схематичное представление идеального кристалла и кристалла с дислокацией

Дислокация характеризуется комплексом взаимосвязанных параметров, определяющих ее структуру и поведение в кристаллической решетке. К числу основных характеристик относятся: вектор Бюргерса, количественно определяющий величину и направление решеточного смещения; линия дислокации, представляющая границу дефекта; плоскость скольжения, задаваемая ее нормалью; тип дислокации (краевая, винтовая, смешанная); знак дефекта; поле упругих напряжений; энергия дислокации, пропорциональная квадрату вектора Бюргерса; плотность дислокаций; скорость их движения и механизмы взаимодействия с препятствиями. Для анализа пластической деформации первостепенное значение имеют вектор Бюргерса, определяющий величину элементарного сдвига, и нормаль к плоскости скольжения, устанавливающая кристаллографическую ориентацию плоскости легкого перемещения дислокации.

Упругопластическая деформация монокристалла галита представляет собой сложный физический процесс, обусловленный активацией и развитием сдвиговых смещений вдоль кристаллографически детерминированных систем скольжения. Каждая такая система характеризуется специфической комбинацией плоскости скольжения и направления сдвига, что в совокупности определяет анизотропный характер пластического течения материала. Кристаллическая структура галита, соответствующая гранецентрированной кубической решетке с ионами хлора и натрия, расположенными в октаэдрических позициях, демонстрирует существенное отличие от типичных металлов с ГЦК-решеткой в отношении предпочтительных систем скольжения.

Экспериментально установлено, что при низких температурах доминирующей системой скольжения в галите является комбинация плоскости $\{110\}$ и направления $\langle 1-10 \rangle$, образующая шесть кристаллографически эквивалентных систем. Данный режим характеризуется минимальным критическим напряжением сдвига, что обусловлено особенностями межатомного взаимодействия в ионном кристалле. Помимо основного режима, в галите идентифицированы две дополнительные системы скольжения: система $\{100\}\langle 001 \rangle$, включающая шесть эквивалентных вариантов, и система $\{111\}\langle 1-10 \rangle$, насчитывающая двенадцать кристаллографических модификаций. В табл. 1 представлены системы скольжения, характерные для монокристаллов галита, с указанием соответствующих режимов скольжения. На рис. 2 представлено схематическое изображение этих систем скольжения в кристаллической структуре галита.

Таблица 1

Характеристики возможных систем скольжения в монокристалле галита

Режим скольжения	Системы скольжения					
	n			b		
$\{110\}\langle 1-10 \rangle$	1	1	0	1	-1	0
	-1	1	0	1	1	0
	1	0	1	1	0	-1
	1	0	-1	1	0	1
	0	1	1	0	1	-1
	0	1	-1	0	1	1
$\{100\}\langle 011 \rangle$	1	0	0	0	1	1
	1	0	0	0	1	-1
	0	1	0	1	0	1
	0	1	0	1	0	-1
	0	0	1	1	1	0
	0	0	1	1	-1	0
$\{111\}\langle 1-10 \rangle$	1	1	1	1	-1	0
	1	1	1	1	0	-1
	1	1	1	0	1	-1
	-1	1	1	0	1	-1
	-1	1	1	1	0	1
	-1	1	1	1	1	0
	1	-1	1	0	1	1
	1	-1	1	1	0	-1
	1	-1	1	1	1	0
	-1	-1	1	0	1	1
	-1	-1	1	1	0	1
	-1	-1	1	1	-1	0

Как ранее было отмечено, наиболее слабой системой скольжения является $\{110\}$, так как для её активации достаточно приложить напряжения в 4.8 МПа; для систем $\{100\}$ и $\{111\}$ необходимая величина напряжений для активации составляет 19.2 МПа [4].

Следует отметить, что, согласно исследованиям Венка и соавторов (1989) [5], активация только режима $\{110\}$ не обеспечивает выполнения критерия Мизеса, требующего наличия

пяти независимых систем скольжения для произвольной однородной деформации поликристаллического агрегата. Это ограничение приводит к необходимости аккомодации деформации через активацию вторичных систем скольжения, а также возможному включению диффузионных механизмов деформации при повышенных температурах. Указанные особенности пластического поведения галита имеют важное значение для понимания механических свойств соляных пород в природных условиях и технологических процессах.

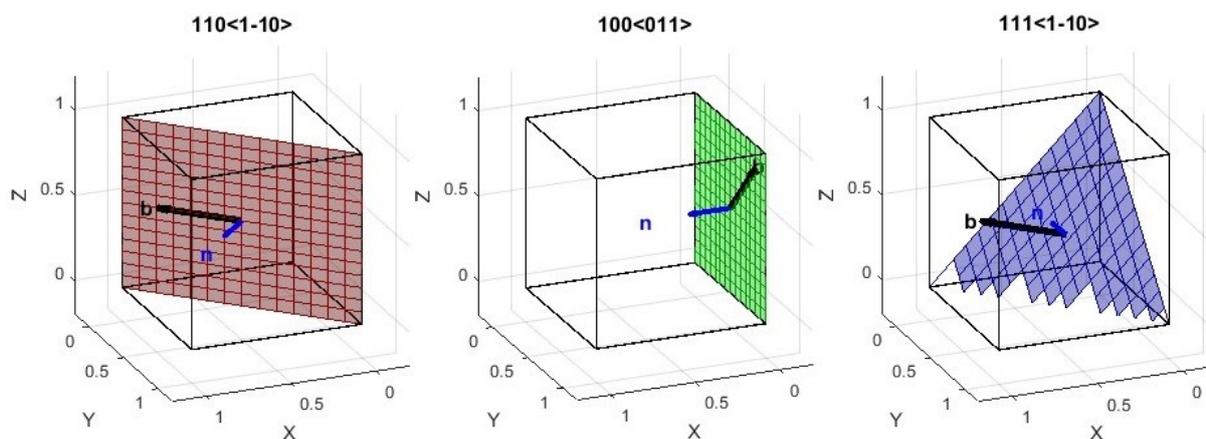


Рис. 2. Системы скольжения в монокристалле галита

Математическая модель и результаты численного моделирования

В настоящей работе предлагается использовать модель, включающую рассмотрение в явной форме физико-механических процессов, обеспечивающих упругопластическое деформирование для кристаллита и образца. П.В. Трусовым в его многочисленных трудах [2] не раз отмечалось следующее: «уровень макро-ПО является основным результирующим уровнем, сопоставимым с размером макрообразца, который является представительным, то есть обладает минимальным объемом материала, содержащим статистически достаточное количество основных носителей рассматриваемых механизмов деформирования, и увеличение размеров которого не приводит к изменению отклика, превышающего принятую предельную погрешность». Подмодель мезоуровня-2 рассматривает поведение отдельных кристаллитов и описывает процессы, происходящие внутри него (дислокационное скольжение, развитие дефектной структуры). Каждый уровень характеризуется своим набором переменных, из которых можно выделить такие, которые имеют аналоги на разных уровнях (например: тензор напряжений, тензор деформаций, тензор спина). Особое внимание при построении определяющих соотношений следует уделить построению моделей каждого уровня, на которых описываются основные физические механизмы деформирования.

Формулировку определяющих соотношений для геометрически нелинейных задач целесообразно осуществлять в скоростях в актуальной конфигурации, поэтому следует определить меру скорости деформации, удовлетворяющую требованию независимости от выбора системы отсчета (условию индифферентности). Для определения скорости изменения длин и направлений материальных отрезков целесообразно использовать обладающий прозрачным геометрическим смыслом транспонированный градиент скорости перемещений $\mathbf{l} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T$.

В качестве меры скорости при построении определяющих соотношений в терминах актуальной конфигурации используется индифферентная мера скорости деформации [3], которая определяется соотношением $\mathbf{z} = \bar{\nabla} \mathbf{v}_r^T = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \boldsymbol{\omega}$, где $\bar{\nabla}$, $\hat{\nabla}$ — операторы Гамильтона, выраженные в терминах ПСК и лагранжевой системы координат, нижний

индекс r означает относительные характеристики (определяемые наблюдателем в соответствующей ПСК). Следует отметить, что для введенной меры справедливо аддитивное разложение на упругую и неупругую составляющие:

$$\mathbf{z} = \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{in} \quad (1)$$

Первое слагаемое из соотношения (1) описывает искажение решетки, а второе определяется через скорости сдвигов по системам скольжения, оставляющих решетку инвариантной и характеризует пластическое деформирование.

Неупругая составляющая меры скорости деформации по соотношению:

$$\mathbf{z}^{in} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \quad (2)$$

где неупругая составляющая \mathbf{z}^{in} меры скорости деформаций определяется по скоростям сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}$ по системам скольжения (СС) краевых дислокаций, которые известны для каждого типа кристаллической решетки, $\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения в актуальной конфигурации, K – удвоенное число кристаллографических систем скольжения.

Принимается гипотеза о том, что дислокации имеют однородное распределение и вводится переменная для описания результата их совместного движения – сдвиги по системам скольжения и соответствующие скорости сдвига. Для определения скоростей сдвига по системам скольжения используется упруговязкопластическое соотношение вида:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^{\frac{1}{m}} \text{H} \left(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)} \right), \quad (3)$$

где $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига по системе скольжения при достижении касательным напряжением критического напряжения сдвига; $\tau^{(k)}$ – действующее напряжение на k -ой системе скольжения; $\tau_c^{(k)}$ – критическое напряжение на k -ой системе скольжения; $1/m$ – показатель скоростной чувствительности материала; $\text{H}(\cdot)$ – функция Хэвисайда.

Для определения касательных и эволюции критических касательных напряжений для внутризеренного скольжения используются следующие соотношения:

$$\tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (4)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши.

Кроме дислокационного механизма, свой вклад в изменение структуры вносит поворот зерен в процессе нагружения, который описывается соотношением:

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{I} \times (\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3) : (\mathbf{I} - \mathbf{z}^{in}), \quad (5)$$

где \mathbf{I} – единичный тензор, \mathbf{k}_i — ортонормированный базис ПСК, ориентация которой относительно фиксированной лабораторной системы.

Каждый кристаллит обладает индивидуальной кристаллографической ориентацией по отношению к системе координат образца. Эта ориентация задается углами Эйлера и описывается с помощью тензора поворота, который эволюционирует в процессе нагружения.

На мезоуровне-2 в качестве основного определяющего соотношения для кристаллита используется закон Гука в скоростной форме:

$$\sigma^{cr} \equiv \dot{\epsilon} \quad \omega \cdot \sigma = \Pi : (1 - z^{in} - \omega), \quad (6)$$

где σ^{cr} – обозначает коротационную производную; Π – тензор упругих свойств кристаллита, его компоненты определены и постоянны в актуальном базисе жесткой подвижной системе координат, вращающейся со спином ω .

Определение отклика рассматриваемого объема на уровне образца достигается за счет осреднения характеристик с уровня отдельных кристаллитов.

Для перехода от тензорного описания напряжённо-деформированного состояния к скалярным величинам, характеризующим его общую интенсивность, используются инварианты тензоров напряжений и деформаций. Интенсивность напряжений (σ_i), также называемая эквивалентным напряжением по Мизесу, является скалярной мерой интенсивности напряжённого состояния и вычисляется через вторые инварианты девиатора напряжений. Для тензора напряжений Коши σ её определение имеет вид:

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{3}{2} s_{ij} s_{ij}} \quad (7)$$

где s_{ij} – девиаторная часть тензора напряжений.

Интенсивность деформаций (ϵ_i), или эквивалентная пластическая деформация, является скалярной мерой накопленной пластической деформации и определяется согласно соотношению:

$$\epsilon_i = \int \sqrt{\frac{2}{3} d_{ij}^p d_{ij}^p} \quad (8)$$

где d_{ij}^p – неупругая составляющая меры скорости деформации, определяемая соотношением (2).

Эти величины позволяют анализировать и представлять механический отклик материала в обобщённом виде, например, в виде кривой деформирования «интенсивность напряжений – интенсивность деформаций».

На рис. 3 представлены результаты численного моделирования образца, состоящего из 100 кристаллитов, подвергнутого одноосному сжатию со скоростью деформации 0.001 с^{-1} . В описанной выше модели не были учтены такие эффекты, как уплотнение на начальном этапе, упрочнение материала, образования микро и мезотрещин, образование макротрещин и разрушение образца.

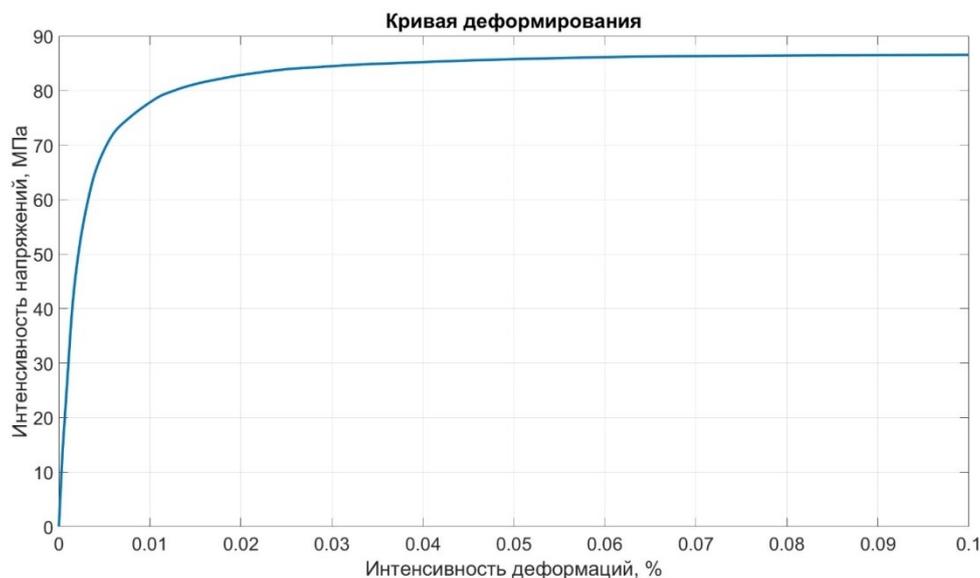


Рис. 3. Результаты численного моделирования образца из 100 кристаллитов

Заключение

Разработанная математическая модель, основанная на физически-ориентированном подходе, позволила описать упругопластическое поведение монокристаллов галита с учётом дислокационного механизма деформирования. Численное моделирование одноосного сжатия образца, состоящего из 100 кристаллитов, продемонстрировало возможность воспроизведения кривых деформирования, характерных для каменной соли. Модель корректно учитывает анизотропию пластичности, связанную с активацией систем скольжения $\{110\}\langle 1-10\rangle$, $\{100\}\langle 011\rangle$ и $\{111\}\langle 1-10\rangle$, а также влияние ориентации кристаллитов на механический отклик. Результаты показывают, что даже без учёта упрочнения, трещинообразования и разрушения модель адекватно описывает начальные стадии пластического течения.

Применение физически-ориентированного подхода сопряжено с рядом вычислительных и методических сложностей. Детальное описание таких физических процессов, как дислокационное скольжение, вращение зерен и эволюция дефектов, приводит к усложнению математического аппарата и росту вычислительной нагрузки. Это особенно заметно при моделировании поликристаллических сред, где учет взаимодействия отдельных кристаллитов требует значительных ресурсов. Кроме того, модель предъявляет высокие требования к точности определения физических констант, что может быть затруднительно в условиях ограниченного экспериментальных данных. Следует также отметить, что в текущей версии модели не рассматриваются такие макроэффекты, как уплотнение материала и развитие трещин, что открывает направления для дальнейшего развития подхода. Верификация модели также требует проведения сложных микроструктурных исследований, что представляет отдельную методическую задачу.

Таким образом, несмотря на высокую физическую обоснованность, применение физически-ориентированного подхода к построению определяющих соотношений для галита остаётся трудоёмким и требует дальнейшего развития, особенно в части учёта повреждённости и разрушения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания (рег. номер НИОКТР: 124020500031-4).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Барях А.А., Санфиоров И.А., Ярославцев А.Г. Задачи геофизики и геомеханики в обеспечении безопасного ведения горных работ на калийных рудниках // Горная промышленность. – 2025. – № 4 S. – С. 140-145. – DOI: 10.30686/1609-9192-2025-4S-140-145.
2. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. – 604 с.: ил.
3. Трусов П.В., Швейкин А.И., Янц А.Ю. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т. 19, № 2. – С. 49-65.
4. Lebensohn R.A., Dawson P.R., Kern H.M., Wenk H.-R. Heterogeneous deformation and texture development in halite polycrystals: Comparison of different modeling approaches and experimental data // Tectonophysics. – 2003. – V. 370, №. 1. – P. 287-311. – DOI: 10.1016/S0040-1951(03)00192-6.
5. Wenk H.R., Canova G.R., Molinari A., Mecking H. Texture development in halite: comparison of Taylor model and self-consistent theory // Acta Metallurgica. – 1989. – V. 37, №. 7. – P. 2017-2029.