

УДК 539.3539.4

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МОРЗЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЗАВИСИМОСТИ ОТКОЛЬНОЙ ПРОЧНОСТИ МЕТАЛЛОВ ОТ СКОРОСТИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ

П. В. Ткачев<sup>1</sup>, А. М. Кривцов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

pavel@paveltkachev.ru, akrivtsov@bk.ru

**PACS 62.20.D-, 81.40.Jj**

В работе производится сравнение результатов компьютерного моделирования откольного разрушения с натурным экспериментом. Моделирование проводится методом динамики частиц, взаимодействие описывается трехпараметрическим парным потенциалом Морзе. Получены зависимости параметров откольного разрушения от безразмерного параметра  $\kappa$ , характеризующего ширину потенциальной ямы. Найдены значения параметра  $\kappa$ , позволяющие описать результаты натуральных экспериментов для различных металлов.

**Ключевые слова:** метод динамики частиц, откольное разрушение, потенциал Морзе.

## 1. Введение

Метод динамики частиц (молекулярной динамики) является перспективным подходом к моделированию откольного разрушения [1–5]. При моделировании материал представляется в виде совокупности взаимодействующих частиц (атомов), движущихся согласно классическим уравнениям динамики. Это позволяет, с одной стороны, учитывать особенности поведения вещества на микроуровне, а с другой стороны, при достаточно большом числе частиц, он может использоваться для верификации и тестирования континуальных моделей среды [1–8]. В классической молекулярной динамике частицы представляют собой атомы вещества, в методе динамики частиц они могут связываться и с другими структурными элементами (например, зёрнами материала) или использоваться как своеобразные конечные элементы — дискретные носители свойств среды.

Для тестирования аналитических и численных моделей высокоскоростного разрушения твердых тел эффективно могут использоваться результаты экспериментов по откольному разрушению пластин, проведенные в широком диапазоне скоростей деформации [9]. Характерной особенностью подобных экспериментов является возможность создавать в материалах чрезвычайно высокие напряжения при простейшем одноосном деформировании.

## 2. Постановка задачи

Известно, что откольная прочность материалов возрастает с увеличением скорости деформирования [9]. Ранее [5] данный эффект был исследован методом динамики частиц с использованием двухпараметрического парного потенциала Леннарда–Джонса

$$\Pi(r) = D \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где  $D$  — энергия связи,  $a$  — равновесное расстояние между частицами, характеризующее длину связи.

Было показано, что использование этого потенциала для компьютерного материала обнаруживает свойства, близкие к свойствам реальных материалов. Полученная в результате моделирования зависимость прочности от скорости деформирования согласуется с данными, полученными из натуральных экспериментов [5]. Однако наличие только двух параметров в потенциале взаимодействия (1) не позволяет влиять на наклон линии тренда. Чтобы снять это ограничение в данной работе для построения компьютерного материала был применен трехпараметрический потенциал Морзе

$$\Pi(r) = D \left[ e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right], \quad (2)$$

где  $D$  — энергия связи,  $a$  — равновесное расстояние между частицами, характеризующее длину связи,  $\alpha$  — дополнительный, третий параметр потенциала Морзе, имеющий размерность обратной длины. Благодаря тому, что потенциал (2) является трехпараметрическим, он имеет один безразмерный параметр

$$\kappa = \alpha a \quad (3)$$

характеризующий ширину потенциальной ямы (увеличение  $\kappa$  приводит к пропорциональному сжатию зависимости  $\Pi(r)$  вдоль оси абсцисс, уменьшение — к растяжению). Все безразмерные параметры, вычисленные для потенциала Морзе, могут зависеть только от  $\kappa$ .

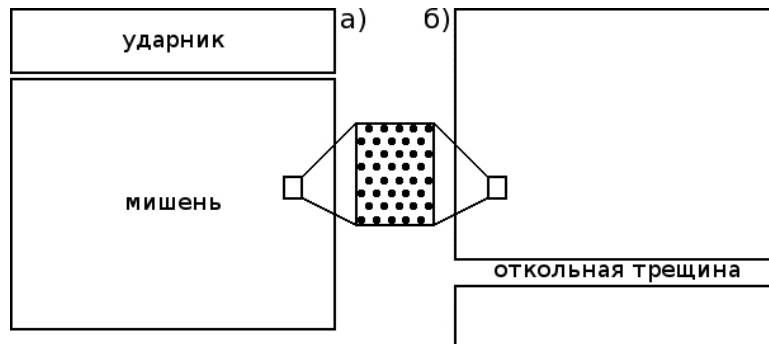


РИС. 1. Схема компьютерного эксперимента:  $a$  — начальное состояние образца,  $b$  — образец после откола

Компьютерная модель эксперимента изображена на рис. 1. Имеются два прямоугольника, заполненных одинаковыми частицами — ударник и мишень (рассматривается двухмерная постановка задачи). Частицы образуют плотноупакованную треугольную кристаллическую решетку, ориентированную таким образом, что одна из сторон треугольников параллельна линии, разделяющей ударник и мишень. Численное решение задачи осуществляется интегрированием уравнений движения частиц

$$M\ddot{r}_k = \sum_{n=1}^N \frac{f(|r_k - r_n|)}{|r_k - r_n|} (r_k - r_n), \quad (4)$$

где  $r_k$  — радиус-вектор  $k$ -й частицы,  $M$  — масса частицы,  $N$  — общее число частиц,  $f(r) = -\Pi'(r)$  — сила взаимодействия между частицами. В начальный момент времени

частицы, формирующие мишень, неподвижны, а частицы, образующие ударник, движутся в направлении мишени (далее — вертикальное направление) с заданной скоростью, равной для всех частиц. В горизонтальном направлении используются периодические граничные условия, в вертикальном — свободные. Подробнее методика моделирования изложена в работах [3, 8].

Схема компьютерного эксперимента: рис. 1а — начальное состояние образца, рис. 1б — образец после откола. Если скорость ударника достаточно велика, то в результате столкновения волн разряжения, отраженных от свободных поверхностей образца, в мишени образуется откольная трещина, приводящая к отделению фрагмента (откольной пластины), имеющего размеры, приблизительно повторяющие размеры ударника.

Изменение толщины ударника позволяет получить ударные импульсы разной длительности и тем самым изменять скорость деформирования. Путем многократных компьютерных экспериментов для каждой толщины ударника определяется пороговое значение его скорости, приводящей к отколу — откольная скорость  $v_*$ . В качестве масштаба скорости удобно выбрать скорость диссоциации

$$v_d = \sqrt{\frac{2D}{M}}, \quad (5)$$

представляющую собой минимальную скорость, которую надо сообщить частице массы  $M$ , находящейся в равновесии в потенциальном поле (2), чтобы она могла уйти на бесконечность.

В качестве микроскопического масштаба времени выбран период колебаний массы  $M$  под действием линейной силы с жесткостью  $C$

$$C = \Pi''(a), \quad T_0 = 2\pi\sqrt{\frac{M}{C}}, \quad (6)$$

шаг интегрирования взят  $0,01T_0$ . Время расчета составило  $2,5t_s$ , где  $t_s$  — время прохождения волной расстояния, равного суммарной толщине ударника и мишени [3]. Расчетные параметры приведены в таблице 1.

ТАБЛИЦА 1. Расчетные параметры

Параметр	Значение
Приблизительное число частиц $N$	10000
Девияция скоростей частиц $\Delta v_0$	0
Радиус обрезания потенциала $a_{cut}$	$2,1a$
Шаг интегрирования $\Delta t$	$0,01T_0$
Время расчета $t_{max}$	$2,5t_s$

### 3. Результаты компьютерного моделирования

Моделирование проводилось для значений  $\kappa$  в интервале от 5 до 10. Все основные расчеты были проведены для образца, содержащего  $10^4$  частиц. Тестовые компьютерные эксперименты, проведенные с использованием  $10^5$  частиц, показали, что увеличение числа частиц приводит лишь к незначительным изменениям в результатах эксперимента. Для  $\kappa$

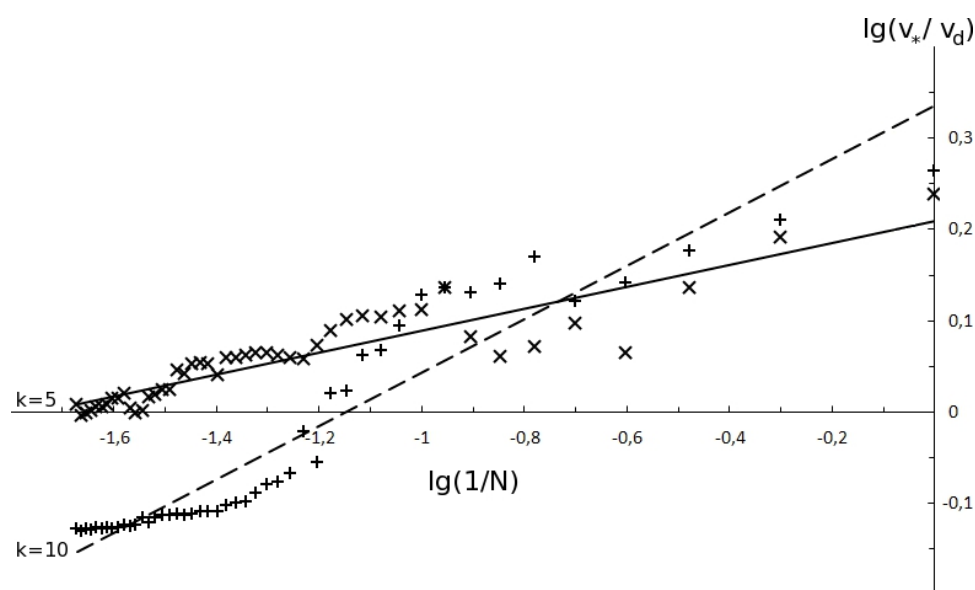


РИС. 2. Зависимость относительной откольной скорости от обратной толщины ударника при разных значениях  $\kappa$  (компьютерное моделирование). Знаками «крест» изображены результаты при  $\kappa = 5$ , сплошной линией изображена соответствующая им линия тренда. Знаками «плюс» изображены результаты при  $\kappa = 10$ , пунктирной линией изображена соответствующая им линия тренда

равного 5 и 10 на рис. 2 показана зависимость логарифма безразмерной откольной скорости  $v_*/v_d$  от логарифма обратной толщины ударника  $1/N$  ( $N$  — число слоев в ударнике).

Полученная зависимость может быть аппроксимирована соотношением

$$\frac{v_*}{v_d} = B \left( \frac{1}{N} \right)^m, \quad (7)$$

где  $B$  и  $m$  — безразмерные коэффициенты. На рис. 3 приведены полученные значения этих коэффициентов для разных  $\kappa$ . Найденные значения позволяют получить следующие эмпирические зависимости коэффициентов от  $\kappa$ :

$$m = -0,0061\kappa^2 + 0,13\kappa - 0,36, \quad B = -0,068\kappa + 2,1, \quad (8)$$

данные зависимости (квадратичная для  $m$  и линейная для  $B$ ) описывают результаты расчетов с погрешностью менее 1 %.

При  $\kappa = 6$  потенциалы Леннарда–Джонса и Морзе близки, что также подтверждается совпадением параметров  $m$  и  $B$  полученных для потенциала Леннарда–Джонса в работе [5] ( $m = 0,16$  и  $B = 1,7$ ) с результатами данного моделирования ( $m = 0,17$  и  $B = 1,7$ ).

#### 4. Сравнение компьютерного моделирования с натурными экспериментами

Сравним полученные результаты с экспериментальными зависимостями откольной прочности от скорости деформирования, представленными в монографии [9]. В качестве величины, характеризующей временную зависимость откольной прочности  $\sigma$ , используется скорость деформирования в разгрузочной части падающего импульса  $\dot{\epsilon} = \dot{V}/V_0$ , где  $V$  — удельный объем среды. Экспериментальные зависимости могут быть аппроксимированы

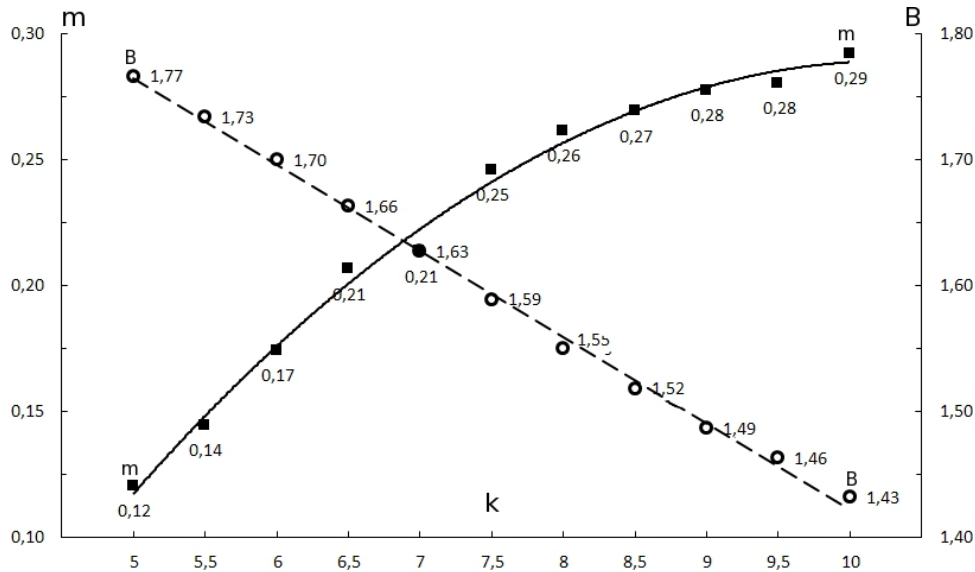


РИС. 3. Значения параметром  $m$  и  $B$  в зависимости от  $\kappa$ . Линиями проведены соответствующие линии тренда

соотношением [9]

$$\sigma = A \left( \frac{\dot{V}}{V_0} \right)^m, \quad (9)$$

где  $A$  — размерный коэффициент,  $m$  — безразмерный показатель степени.

Предположение, что откольная скорость  $v_*$  пропорциональна откольной прочности  $\sigma$ , а обратная толщина ударника  $1/N$  пропорциональна скорости деформирования  $\dot{V}/V_0$  позволяет описать результаты компьютерного эксперимента формулой (5). Причем показатель степени  $m$  должен быть одинаков в зависимостях (4) и (5). В таблице 2 представлены сравнительные значения показателя  $m$  для компьютерного и реальных материалов [9].

ТАБЛИЦА 2. Значения показателя  $m$ , полученные из натуральных экспериментов для различных металлов, и соответствующие им параметры  $\kappa$  для компьютерного материала

Материал	$m$	$\kappa$
Сталь нержавеющая X18H10T	0,11	4,9
Титан высокочистый	0,19	6,5
Медь	0,20	6,6
Алюминий Amr6M	0,21	7,0

В работе [5] для компьютерного материала, описываемого потенциалом Леннарда–Джонса (1), было получено значение параметра  $m = 0,16$ , находящееся между значениями для нержавеющей стали и высокочистым титаном. Наличие только двух параметров — равновесного расстояния  $a$  и энергии связи  $D$ , не позволяет получить другие значения  $m$  для потенциала Леннарда–Джонса. Потенциал Морзе (2) содержит третий параметр  $\kappa$ , что позволило получить различные значения параметра  $m$ , в том числе соответствующие реальным материалам (таблица 2).

## 5. Выводы

В работе установлена зависимость параметров  $m$  и  $B$  (рис. 3), характеризующих откольное разрушение, от  $\kappa$  — безразмерного параметра потенциала Морзе. С увеличением  $\kappa$  линейно уменьшается значение параметра  $B$ , параметр  $m$  увеличивает свое значение по квадратичному закону. Полученные зависимости позволяют подобрать значения параметров потенциала взаимодействия для описания экспериментальной зависимости откольной прочности от скорости деформирования для ряда металлов.

## Литература

- [1] Holian B.L. Atomistic Computer-Simulations of Shock Waves // Shock Waves. — 1995. — V. 5, № 3. — P 149–157.
- [2] Krivtsov A. M. Relation between Spall Strength and Mesoparticle Velocity Dispersion // International Journal of Impact Engineering. — 1999. — V. 23. — P. 477–487.
- [3] Кривцов А. М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // Физика твердого тела. — 2004. — Т. 46, В. 6. — С. 1025–1030.
- [4] Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. — М.: Физматлит, 2007. — 304 с.
- [5] Индейцев Д. А., Кривцов А. М., Ткачев П. В. Исследование методом динамики частиц взаимосвязи между откольной прочностью и скоростью деформирования твердых тел // Доклады Академии Наук. — 2006. — Т. 407, № 3. — С. 341–343.
- [6] Abraham F. F., Walkup R., Gao H., Duchaineau M., De La Rubia T. D., Seager M. Simulating materials failure by using up to one billion atoms and the world's fastest computer: Work-hardening // Proceedings of National Academy of Sciences (USA). — 2002. — V. 99, № 9. — P. 5783–5787.
- [7] Головнева Е. И., Головнев И. Ф., Фомин В. М. Молекулярно-динамический анализ динамического разрушения наноструктур // Физическая Мезомеханика. — 2003. — Т. 6, В. 2. — С. 37–46.
- [8] Кривцов А. М., Мясников В. П. Моделирование методом динамики частиц изменения внутренней структуры и напряженного состояния в материале при сильном термическом воздействии // Известия РАН. Механика твердого тела. — 2005. — № 1. — С. 87–102.
- [9] Канель Г. И., Разоренов С. В., Уткин А. В., Фортов В. Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. — М.: Янус-К, 1996. — 406 с.