Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения

© А.М. Кривцов

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: krivtsov@AK5744.spb.edu

(Поступила в Редакцию 2 июня 2003 г.
В окончательной редакции 26 сентября 2003 г.)

С помощью метода молекулярной динамики моделируется откольное разрушение при плоском ударном взаимодействии пластин. Исследуется влияние дефектов кристаллической структуры материала на распространение ударной волны и процесс откольного разрушения. Для описания пластических эффектов предлагается использовать модель неидеальной кристаллической упаковки частиц, содержащей дефекты (вакансии). Предлагаемая модель позволяет описать разделение фронта ударной волны на упругий предвестник и пластический фронт и получить профили скорости свободной поверхности, близкие к наблюдаемым в экспериментах.

Работа выполнена при поддержке гранта Минобразования России по фундаментальным исследованиям в области естественных и точных наук № Е02-4.0-33.

1. Введение

В последние десятилетия метод молекулярной динамики (МД) все более широко применяется для моделирования деформирования и разрушения твердых тел [1–5], представление материала в виде совокупности взаимодействующих частиц позволяет описывать его механические свойства как на микро-, так и на макроуровне [6,7]. Для построения компьютерных моделей высокоскоростного разрушения материалов удобно использовать результаты натурных экспериментов по откольному разрушению, создающих в материале чрезвычайно высокие нагрузки при простейшем одноосном деформировании [8–10]. В большинстве работ при МД-моделировании откольного разрушения используются идеальные монокристаллические упаковки частиц [11–13]. Однако механические свойства материалов весьма чувствительны к дефектам внутренней структуры [14,15]. Кроме того, во многих процессах, где реальные материалы проявляют пластические свойства, монокристаллы ведут себя упругим образом вплоть до разрушения. Хотя пластическое поведение и обнаруживается при МД-моделировании распространения ударных волн в монокристаллических материалах [16], однако оно существенно отличается от пластического деформирования реальных материалов. В частности, в натурных экспериментах наблюдается четкое разделение ударной волны на упругий предвестник и пластический фронт, которое слабо выражено или вообще отсутствует для идеальных монокристаллических материалов. Для решения этой проблемы в данной работе рассматривается модель кристаллического материала с искусственно введенными дефектами внутренней структуры (вакансиями), позволяющая описать указанные явления.

2. Методика моделирования

Техника компьютерного эксперимента в данной работе та же, что и в работах [13,17]; подробно методика моделирования описана в [18]. Материал моделируется совокупностью частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала $\Pi(r)$. Уравнения движения частиц имеют вид

$$m\ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1}^{N} \frac{f(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|)}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n), \qquad (1)$$

где $\mathbf{r}_k$ — радиус-вектор k-й частицы, m — масса частицы, N — общее число частиц, $f(r) = -\Pi'(r)$ — сила взаимодействия между частицами. Диссипативные силы в данной системе в отличие от [13] не используются. Обозначим символом a — равновесное расстояние между двумя частицами ($f(a) \equiv 0$), символом C — жесткость межатомной связи в положении равновесия, T_0 — период колебаний массы m под действием линейной силы с жесткостью C,

$$C = \Pi''(a) \cong -f'(a), \quad T_0 = 2\pi\sqrt{m/C}. \qquad (2)$$

Величины a и T_0 будем использовать в качестве микроскопических масштабов расстояния и времени.

Минимальная скорость, которую нужно сообщить частице массы m, находящейся в равновесии в потенциальном поле $\Pi(r)$, чтобы она могла уйти на бесконечность (скорость диссоциации), равна

$$v_d = \sqrt{2D/m}, \qquad (3)$$

где $D = \Pi(a)$ — энергия связи. Скорость распространения длинных волн в бесконечной цепочке определяется формулой

$$v_0 = \sqrt{a^2C/m}. \qquad (4)$$

В данной работе рассматривается двумерный материал. В том случае, если упаковка частиц представляет собой идеальную треугольную кристаллическую решетку, скорость v_l распространения длинных продольных волн равна

$$v_l = \sqrt{\frac{9}{8}}\, v_0 \approx 1.06 v_0. \tag{5}$$

Проиллюстрируем это на примере классического потенциала Леннарда–Джонса

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

где D и a — введенные ранее энергия связи и равновесное межатомное расстояние. Соответствующая сила взаимодействия $f(r) = -\Pi'(r)$ имеет вид

$$f(r) = \frac{12D}{a}\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{13} - \left(\frac{a}{r}\right)^{7}\right]. \tag{7}$$

Жесткость связи C и энергия связи D в случае потенциала Леннарда–Джонса удовлетворяют соотношению $C = 72D/a^2$, в результате чего скорость распространения длинных волн и скорость диссоциации связаны простым соотношением $v_0 = 6v_d$. Потенциал Леннарда–Джонса является простейшим потенциалом, позволяющим учесть наиболее общие свойства межатомного взаимодействия: отталкивание при сближении частиц, притяжение при их удалении и практическое отсутствие взаимодействия на больших расстояниях. Поскольку в данной работе нас интересует не столько моделирование поведения конкретного материала, сколько принципиальная возможность описания пластических эффектов при откольном разрушении, ограничимся рассмотрением потенциала Леннарда–Джонса. Результаты работы без труда могут быть распространены на более сложные потенциалы, которые точнее описывают свойства конкретных материалов.

3. Моделирование откольного разрушения

На рис. 1 приведена схема компьютерного эксперимента. Частицы образуют два прямоугольника, лежащих в плоскости xz. Прямоугольники моделируют собой сечения ударника a и мишени b. Ударник и мишень состоят из одинаковых частиц, взаимодействующих по закону (6). Частицы упорядочены в треугольную решетку, одинаковую для ударника и мишени, которая ориентирована таким образом, чтобы один из ее базисных векторов был направлен вдоль оси x. На всех внешних границах используются свободные граничные условия. Шаг решетки a_e в исходной конфигурации выбран так,[1] чтобы обеспечить отсутствие внутренних напряжений при радиусе обрезания потенциала $2.1a$ [18].

[1] $a_e = 0.9917496a$.

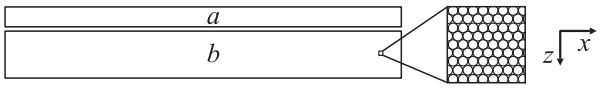

Рис. 1. Схема компьютерного эксперимента. a — ударник, b — мишень.

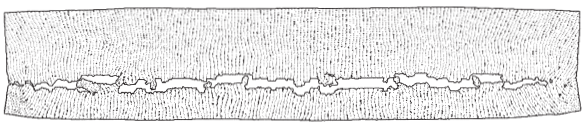

Рис. 2. Образование откольной трещины.

Изначально мишень имеет нулевую скорость, скорость ударника направлена вдоль оси z в сторону мишени. Кроме того, в начальный момент времени каждой частице ударника и мишени добавляется случайная скорость, выбранная из двумерного равномерного случайного распределения с заданным значением дисперсии σ, где

$$\sigma = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(V_k - \bar{V})^2, \quad \bar{V} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} V_k. \tag{8}$$

Здесь V_k — проекция скорости k-й частицы на направление удара; индекс k пробегает значения внутри некоторой совокупности частиц, входящей в общее множество частиц, рассматриваемых в эксперименте. Далее также используется девиация скоростей частиц, определяемая формулой $\Delta V = \sqrt{\sigma}$.

Состояние ударника и мишени после компьютерного эксперимента показано на рис. 2. Хорошо видна откольная трещина, образовавшаяся в мишени. Граница между ударником и мишенью, напротив, незаметна в силу идеального совпадения контактирующих поверхностей (пространственное расположение кристаллической решетки в ударнике и мишени согласовано). Значения расчетных параметров в этом случае приведены в таблице (эксперимент A). Компьютерные эксперименты показывают, что минимальная скорость ударника, при которой наступает откол, приближенно равна скорости

Расчетные параметры

Параметр	Эксперимент		
	A	B	C
Приблизительное число частиц N	100 000	500 000	1 000 000
Скорость ударника v_{imp}	$1.05v_d$	v_d	$1.1v_d$
Девиация скоростей частиц ΔV_0	$0.001v_d$	0	0
Концентрация вакансий p, %	0	6	1
Радиус обрезания потенциала a_{cut}	$2.1a$	$2.1a$	$2.1a$
Ширина ударника (мишени) w	$708a$	$1584a$	$2238a$
Толщина ударника h_1	$35a$	$78a$	$111a$
Толщина мишени h_2	$88a$	$196a$	$277a$
Число слоев частиц N_z	142	319	450
Шаг интегрирования Δt	$0.03T_0$	$0.03T_0$	$0.03T_0$
Время расчета $t_{\max}$	$3t_s$	$3t_s$	$3t_s$

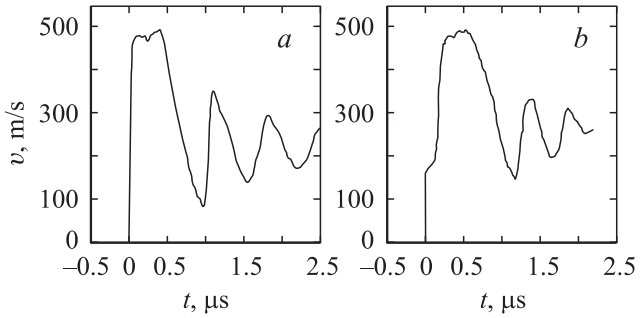

Рис. 3. Зависимость скорости свободной поверхности мишени от времени. *a* — монокристалл (расчет), *b* — титановый сплав (эксперимент).

диссоциации v_d, поэтому целесообразно сравнивать используемые в расчете скорости именно с этой величиной, как это и сделано в таблице. Размеры ударника и мишени в данном компьютерном эксперименте удовлетворяют соотношениям $h_1/w \approx 1/20$, $h_1/h_2 \approx 2/5$. Приближенное значение времени откола t_s определяется по формуле $t_s = (h_1 + h_2)/v_l$, где h_1 и h_2 — толщины ударника и мишени, v_l определяется (5). В данном случае $t_s = 18.4T_0$. Разумеется, эта оценка очень приближенная, так как v_l – скорость продольных волн линейной теории, т. е. предельное значение для волн малой амплитуды. По нелинейной теории волны в монокристаллическом материале распространяются тем быстрее, чем выше их амплитуда. В кристаллическом материале, содержащем дефекты, скорость распространения волн, напротив, может быть ниже v_l. Кроме того, волна имеет некоторую протяженность в пространстве, что также может внести погрешность в определение времени откола. Тем не менее время t_s очень удобно использовать в качестве масштаба времени, так как оно имеет ясный физический смысл и легко определяется. Величина N_z равна полному числу слоев частиц (ударник + мишень) в направлении удара.

На рис. 3, *a* приведена зависимость скорости свободной поверхности мишени от времени, полученная в результате компьютерного моделирования. Для измерения скорости свободной поверхности использовались два нижних слоя частиц, причем для устранения краевых эффектов бралась только центральная часть указанных слоев шириной $w_0 = w - 2(h_1 + h_2)$. Полученная зависимость дополнительно осреднялась по времени для устранения высокочастотных колебаний. Для сравнения на рис. 3, *b* приведена аналогичная зависимость, полученная в процессе натурного эксперимента по откольному разрушению в титановом сплаве [9] (скорость ударника 602 m/s). Шкалы времени и скорости на рис. 3, *a* выбраны в соответствии с натурным экспериментом. Форма графиков во многом совпадает: главный максимум, соответствующий выходу ударной волны на свободную поверхность, и колебания в откольной пластине одинаково ярко выражены на обеих зависимостях. Однако наблюдаются и существенные различия. Прежде всего это различие в форме фронта ударной волны. Если в натурном эксперименте ярко выражено разделение фронта на упругий предвестник и следующий за ним пластический фронт, то при численном эксперименте такого разделения не наблюдается. Из-за идеальной (бездефектной) структуры модельного монокристаллического материала имеется только упругая составляющая фронта, пластический фронт фактически отсутствует.

Для моделирования пластического деформирования на фронте ударной волны рассмотрим модель кристаллического материала, содержащего дефекты внутренней структуры. В качестве исходного материала выберем монокристаллический материал, рассмотренный выше. Для получения неидеального материала из него случайным образом удаляются атомы до достижения необходимой концентрации дефектов (вакансий). Последнюю будем вычислять как отношение числа удаленных атомов к исходному числу атомов, выраженное в процентах. При

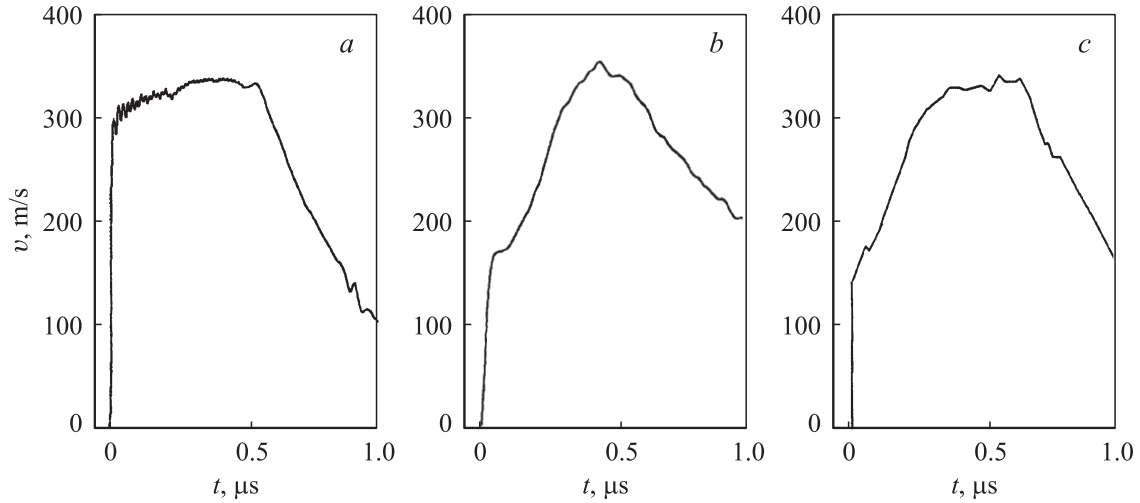

Рис. 4. Зависимость скорости свободной поверхности мишени от времени. *a* — монокристалл (расчет), *b* — кристалл, содержащий дефекты (расчет), *c* — титановый сплав ВТ-20 (эксперимент).

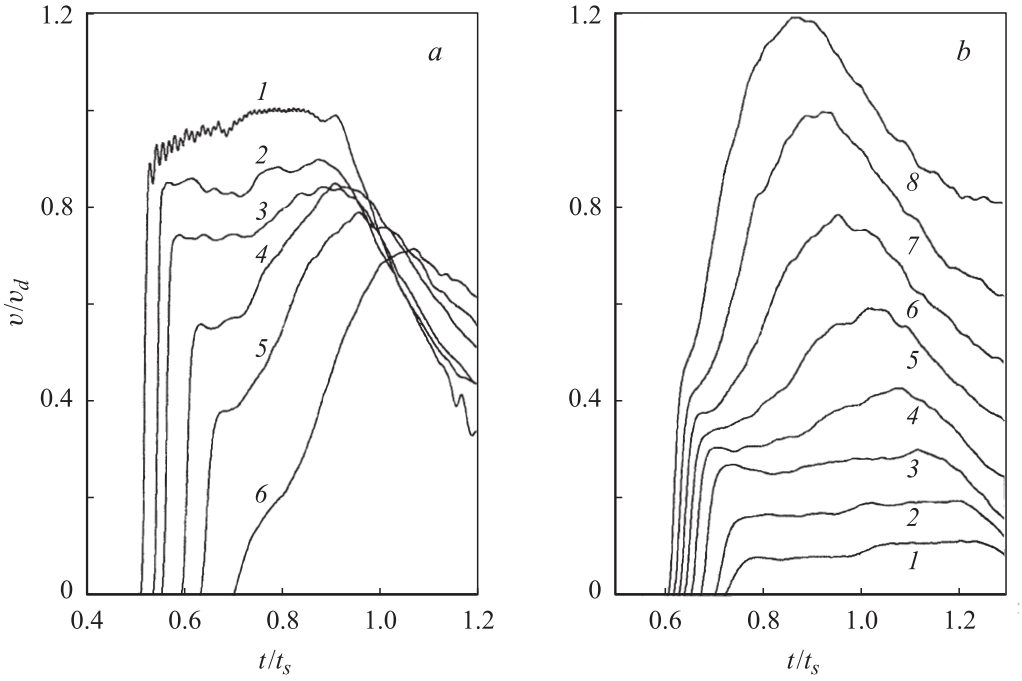

Рис. 5. Профили скорости свободной поверхности мишени (моделирование). a — при $v_{\text{imp}} = v_d$ и доле вакансий 0 (*1*), 1 (*2*), 2 (*3*), 4 (*4*), 6 (*5*) и 9% (*6*); b — при доле вакансий 6% и $v_{\text{imp}}/v_d = 0.1$ (*1*), 0.2 (*2*), 0.4 (*3*), 0.6 (*4*), 0.8 (*5*), 1.0 (*6*), 1.2 (*7*) и 1.4 (*8*)

продвижении ударной волны по такому материалу вакансии инициируют необратимые изменения внутренней структуры, приводящие к пластическим деформациям среды.

Исходные параметры представлены в таблице (эксперимент B). Модель содержит $\sim 5 \cdot 10^5$ частиц, пропорции размеров ударника и мишени прежние. На рис. 4, a, b приведены зависимости скорости свободной поверхности от времени при выходе ударной волны на поверхность для идеального монокристаллического и неидеального материала (доля вакансий 6%). Для сравнения на рис. 4, c представлен аналогичный график, полученный в результате натурных экспериментов по откольному разрушению [9] в титановом сплаве ВТ-20 (скорость ударника 365 m / s). Шкалы времени и скорости на рис. 4, a, b выбраны в соответствии с натурным экспериментом. На рис. 4, a фронт ударной волны практически вертикален и несет исключительно упругую деформацию. На рис. 4, b, c, напротив, отчетливо выражен упругий предвестник, за которым следует пластический фронт.

Соотношение между амплитудами упругого и пластического фронтов зависит от концентрации дефектов и скорости ударника, что проиллюстрировано на рис. 5, a, b. На рис. 5, a представлены профили скорости свободной поверхности мишени, полученные из компьютерного эксперимента при тех же значениях параметров, что и на рис. 3, b, но при разных концентрациях дефектов. Масштабы времени и скорости выбраны соответственно в единицах расчетного времени откола t_s и скорости диссоциации v_d. С увеличением числа дефектов амплитуда упругого предвестника убывает значительно быстрее, чем амплитуда пластического фронта, что приводит к их четкому разделению. На рис. 5, b представлены результаты аналогичных экспериментов, но при неизменной концентрации дефектов (6%) и разных значениях скорости ударника v_{imp}. При низких значениях $v_{\text{imp}} \leq 0.2 v_d$ фронт ударной волны содержит только упругую составляющую, однако с ростом скорости ударника появляется пластическая компонента, которая при дальнейшем увеличении v_{imp} возрастает значительно быстрее упругой.

4. Обсуждение и заключительные замечания

Для выяснения вопроса о том, что именно происходит с дефектами на фронте ударной волны, рассмотрим элемент „виртуального“ материала до и во время прохождения ударной волны (рис. 6, 7). Эти рисунки получены в результате компьютерного эксперимента по откольному разрушению, параметры для которого приведены в таблице (эксперимент C). Элемент материала, представленный на рис. 6, 7, содержит около 4800 частиц, что составляет менее 0.5% от объема всего образца, использованного в компьютерном эксперименте. Для исследования поведения дефектов анализировался весь образец; рассматриваемый элемент материала выбран для наглядности. На рис. 6, 7 темным выделены частицы, находящиеся вблизи дефектов внутренней структуры

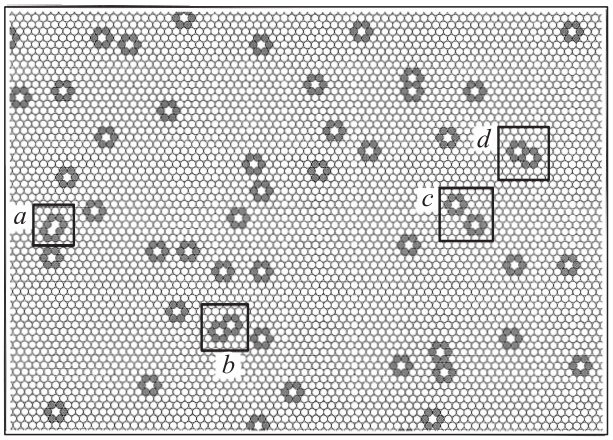

Рис. 6. Внутренняя структура „виртуального“ материала до прохождения ударной волны. a — микропора, b–d — парные вакансии. Темным выделены частицы, имеющие на расстоянии $1.1a$ менее шести соседей.

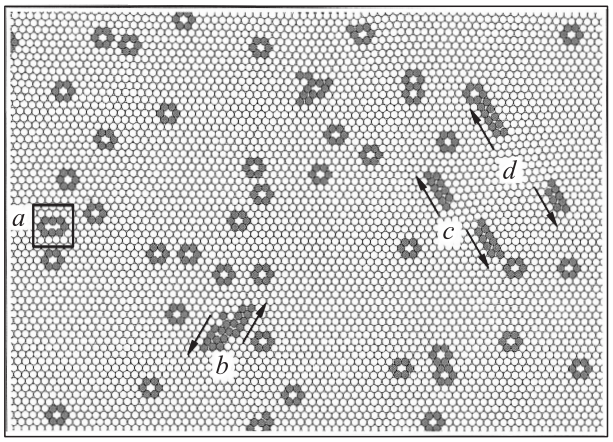

Рис. 7. Изменение структуры материала в процессе прохождения ударной волны. a — микропора, b — зарождение дислокаций, c, d — распад парных вакансий на пары дислокаций.

материала.[2] В недеформированном материале (рис. 6) дефекты представляют собой исключительно вакансии. Однако в силу их случайного расположения некоторые из них оказываются в непосредственной близости друг от друга, некоторые объединяются, образуя микропоры (рис. 6, a). Выделим несколько таких близко расположенных вакансий (рис. 6, a–d) и проследим за их эволюцией при прохождении ударной волны (рис. 7, a–d). Из рис. 7, a видно, что в результате воздействия ударной волны микропора изменила свою ориентацию. Что касается остальных выделенных групп вакансий, то, согласно рис. 7, c, d, они распадаются на пары движущихся дислокаций (стрелками показаны направления движения дислокаций). Фронт ударной волны на рис. 7 движется сверху вниз; этим объясняется тот факт, что на рис. 7, b–d видны разные стадии распада группы вакансий: зарождение дислокаций на рис. 7, b и их разбегание на рис. 7, c, d. Сравнение одиночных вакансий на рис. 6 и 7 показывает, что ударная волна заданной интенсивности не способна вызвать их миграцию или трансформирование в дислокации. Таким образом, пластичность в рассматриваемом неидеальном кристалле реализуется в основном за счет распада близко расположенных вакансий на дислокационноподобные дефекты, которые, перемещаясь, обеспечивают сдвигообразование на фронте ударной волны.

Отметим, что даже очень незначительное число дефектов приводит к существенному изменению профиля скорости свободной поверхности. На рис. 8 представлены результаты компьютерного эксперимента для идеального монокристалла и аналогичного кристалла, из которого удален один атом из тысячи — концентрация дефектов 0.1% (скорость ударника $v_{\text{imp}} = 1.1v_d$, остальные параметры соответствуют таблице, эксперимент B). Для большей наглядности не проведено временно́го осреднения графиков. Поэтому на профиле для идеального монокристалла хорошо видны интенсивные высокочастотные колебания на фронте ударной волны, порожденные дискретностью МД-представления. Эти колебания практически исчезают в материале, содержащем дефекты. Кроме того, в нем сильно видоизменяются колебания в откольной пластине и значительно увеличивается скорость их затухания. При такой низкой концентрации дефектов, как в данном эксперименте, еще не происходит разделения упругого и пластического фронтов. Однако, по-видимому, при увеличении протяженности кристалла в направлении удара подобное разделение будет проявляться и в этом материале.

Таким образом, монокристаллический материал, состоящий из частиц, взаимодействующих по закону Леннарда–Джонса и содержащий достаточную концен-

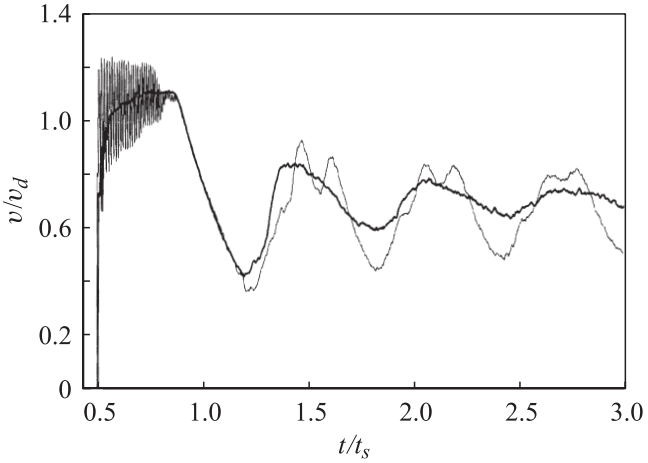

Рис. 8. Сравнение профиля скорости свободной поверхности при увеличении концентрации вакансий от 0 (тонкая линия) до 0.1% (жирная линия).

[2] Точнее, выделены частицы, имеющие на расстоянии $1.1a$ менее шести соседей (для идеальной треугольной решетки число соседей каждого атома равно шести).

трацию дефектов кристаллической решетки, при ударном нагружении демонстрирует ярко выраженные пластические эффекты, такие как разделение фронта ударной волны на упругую и пластическую составляющие. В результате этого удается получить временны́е зависимости скорости свободной поверхности, очень близкие к реализующимся в натурных экспериментах, в частности по откольному разрушению титановых сплавов.

Автор благодарен Ю.И. Мещерякову за экспериментальные данные и полезные обсуждения.

Список литературы

[1] B.L. Holian. Shock Waves **5**, *3*, 149 (1995).
[2] А.И. Лобастов, В.Е. Шудегов, В.Г. Чудинов. ЖТФ **70**, *4*, 123 (2000).
[3] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. ФТТ **43**, *4*, 644 (2001).
[4] F.F. Abraham, R. Walkup, H. Gao, M. Duchaineau, T.D. De La Rubia, M. Seager. Proc. of National Academy of Sciences (USA) **99**, *9*, 5783 (2002).
[5] А.М. Кривцов. В сб.: Проблемы механики деформируемого твердого тела. Межвуз. сборник, посвященный 70-летию акад. Н.Ф. Морозова. СПбГУ, СПб (2002). С. 173–178.
[6] А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов. ДАН **381**, *3*, 825 (2001).
[7] А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов. ФТТ **44**, *12*, 2158 (2002).
[8] A.M. Rajendran, D.J. Grove. Int. J. Impact Eng. **18**, *6*, 611 (1996).
[9] Yu.I. Mescheryakov, A.K. Divakov, N.I. Zhigacheva. Shock Waves **10**, 43 (2000).
[10] Г.И. Канель, С.В. Разоренов, В.Е. Фортов. В сб.: Проблемы механики деформируемого твердого тела. Межвуз. сборник, посвященный 70-летию акад. Н.Ф. Морозова. СПбГУ, СПб (2002). С. 159–165.
[11] N.J. Wagner, B.L. Holian, A.F. Voter. Phys. Rev. A **45**, *12*, 8457 (1992).
[12] W.C. Morrey, L.T. Wille. Comp. Mater. Sci. **10**, *1–4*, 432 (1998).
[13] A.M. Krivtsov. Int. J. Impact Eng. **23**, *1*, 466 (1999).
[14] С.П. Никаноров, Б.К. Кардашев. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. Наука, М. (1985). 254 с.
[15] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. ФТТ **45**, *3*, 542 (2003).
[16] B.L. Holian, P.S. Lomdahl. Science **280**, *5372*, 2085 (1998).
[17] A.M. Krivtsov, Y.I. Mescheryakov. Proc. SPIE **3687**, 205 (1999).
[18] А.М. Кривцов, Н.В. Кривцова. Дальневосточ. мат. журн. **3**, *2*, 254 (2002).