

УДК 004.942

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПЛАСТИНЫ ИЗ НИКЕЛЯ ПРИ ПРИЛОЖЕНИИ РАСТЯГИВАЮЩЕЙ И СДВИГОВОЙ НАГРУЗКИ В ПАКЕТЕ LAMMPS

© Ермилов Е.П., Степанова Л.В.

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

astraZero_0309@outlook.com, stepanova.lv@ssau.ru

Рассматривается задача моделирования растяжения кристалла никеля с гранецентрированной кубической решеткой (ГЦК) методом молекулярной динамики (МД). Методом МД называют процедуру наблюдения и отслеживания временной эволюции системы взаимодействующих атомов или частиц, посредством интегрирования уравнений их движения. Метод МД подчиняется классической Ньютоновской механике и неприменим в релятивистских условиях [1; 2].

В качестве потенциала межатомного взаимодействия был избран метод погруженного атома (EAM), в котором обязателен учет изменения полной потенциальной энергии при смещении атома i для расчета вклада силы, действующей на данный атом. Технологический стек в данной работе состоит из пакета молекулярной динамики LAMMPS, поддерживающего широкий ряд потенциалов, например вышеупомянутый EAM, а также AIREBO, REBO, etc. В качестве программы для визуализации была выбрана VMD, позволяющая в трехмерном изображении отследить шаги сдвига на модели пластины. При моделировании была выбрана среда при температуре 300 К, образец пластины никеля из 4000 атомов подвергался сдвигу вдоль оси X. Расстояние между атомами 3.52 Å. Изначально система подверглась релаксации для установки в начальное положение (см. рис. 1).

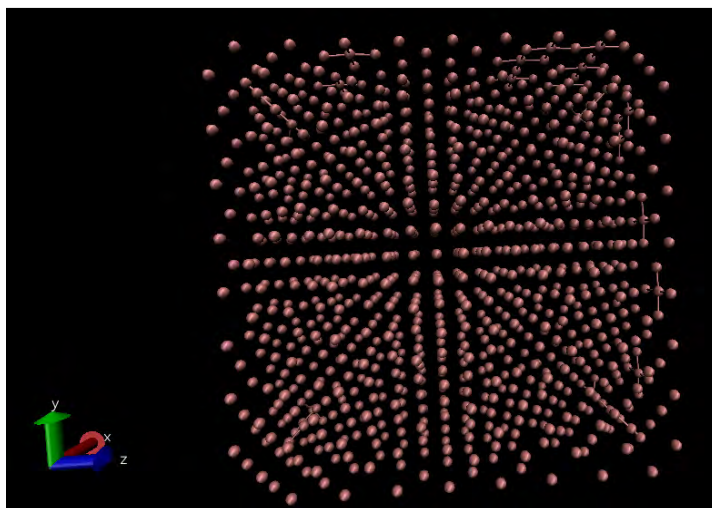


Рисунок 1 – Решетка в релаксированном состоянии

После подготовительного этапа был произведен цикл нагружений образца кубической формы с целью нахождения составляющих тензора упругих модулей. Среднее время, затрачиваемое на моделирование одного нагружения, составила на

ЭВМ с RAM = 4 Gb около 14 минут. Определенные компоненты тензора упругих модулей находятся в хорошем соответствии с макроскопическими данными (рис. 2).

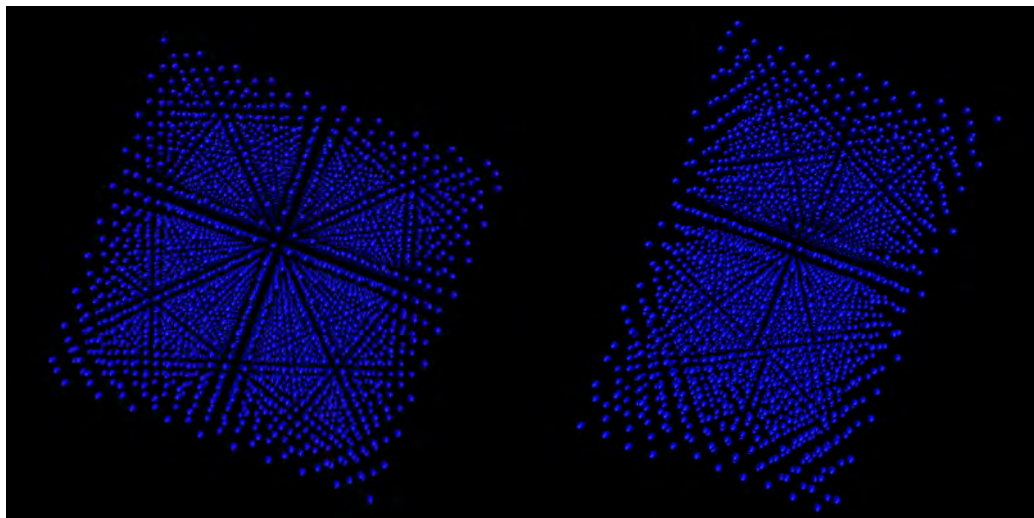


Рисунок 2 – Нулевой и 176 из 200 шагов моделирования

По результатам моделирования был построен график зависимости напряжения-деформации пластины никеля. На графике наблюдается, что критическое значение деформации находится около показания $\sim 0,1$. При бóльших деформациях система приближается к моменту разрушения (рис. 3).

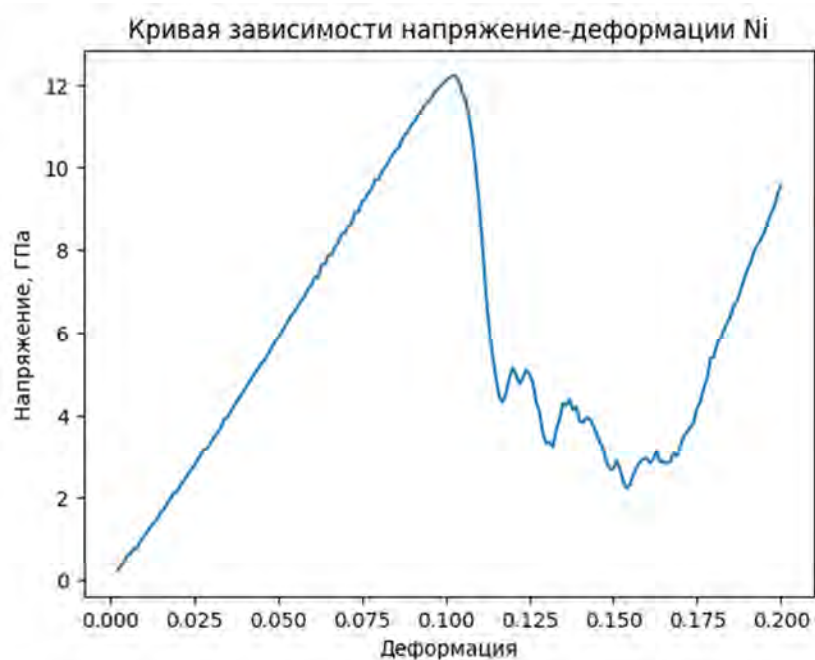


Рисунок 3 – Кривая зависимости напряжение-деформации никеля

Библиографический список

1. Аксенова Е.В., Кшевецкий М.С. Вычислительные методы исследования молекулярной динамики. СПб.: СПбГУ, 2009. 50 с.
2. Моделирование в физике конденсированного состояния на основе применения программы LAMMPS / С.В. Дивинский, А.В. Покоев, Д.С. Синеглазов [и др.]. Самара: Издательство Самарского университета, 2020. 100 с. ISBN: 978-5-7883-1586-7.