

УДК 539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗРУШЕНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ: ВЕРИФИКАЦИЯ С РЕШЕНИЕМ ХАТЧИНСОНА-РАЙСА-РОЗЕНГРЕНА

© Гацко А., Степанова Л.В.

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

e-mail: error37lol@gmail.com, stepanova.lv@ssau.ru

Ключевые слова: молекулярная динамика, трещина, атомистические напряжения, линейный режим деформирования, нелинейный режим деформирования.

Метод молекулярной динамики является мощным инструментом компьютерного моделирования, широко используемым в современной науке для изучения динамики атомов и молекул в различных условиях, что во многих случаях позволяет отказаться от трудоемких натурных экспериментов. В современной механике деформируемого твердого тела он позволяет проводить расчеты параметров механики разрушения, включая детальный анализ процессов зарождения и распространения трещин, а также эволюции пластической деформации в критической области у вершины трещины.

Для реализации эксперимента методом молекулярной динамики в программном комплексе LAMMPS [3] был разработан алгоритм, моделирующий поведение пластины с центральным вырезом при одноосном растяжении. Геометрические размеры пластины – $361,5 \times 361,5 \times 3,615 \text{ \AA}$, вырез длиной $36,15 \text{ \AA}$ моделировался путем исключения межатомных взаимодействий между двумя заранее определенными группами атомов. Для задания межатомных взаимодействия был выбран потенциал погруженного атома, а именно Cu_u3.eam , что соответствует ГЦК-меди. Для минимизации граничных эффектов были использованы периодические граничные условия, был реализован процесс минимизации энергии системы для достижения равновесной конфигурации системы. Пластина растягивается вдоль оси y с постоянной скоростью деформации $\varepsilon_{22} = 0,01 \text{ пс}^{-1}$. Температура моделирования поддерживалась на уровне 300 K с помощью NVT ансамбля. В данном температурном режиме более обоснованным представляется сравнение результатов с решением Хатчинсона-Райса-Розенгрена [1], так как наблюдаются такие эффекты, как развитие пластической деформации и степенная зависимость между напряжениями и деформациями, следующая закону Рамберга-Осгуда. На каждом шаге моделирования компоненты тензора напряжений и деформаций записывались в выходной файл. Полученные данные затем визуализировались с помощью пакета OVITO, принимающего этот файл в качестве исходных данных для построения графиков и анализа. Для анализа в дальнейшем с методом молекулярной динамики были построены графики угловых распределений при различных значениях n (рис. 1, 2). Был проведён сравнительный анализ с данными, полученными с использованием молекулярно-динамического пакета LAMMPS. Точки соответствуют атомистическому моделированию, сплошные линии соответствуют решению Хатчинсона-Райса-Розенгрена [2].

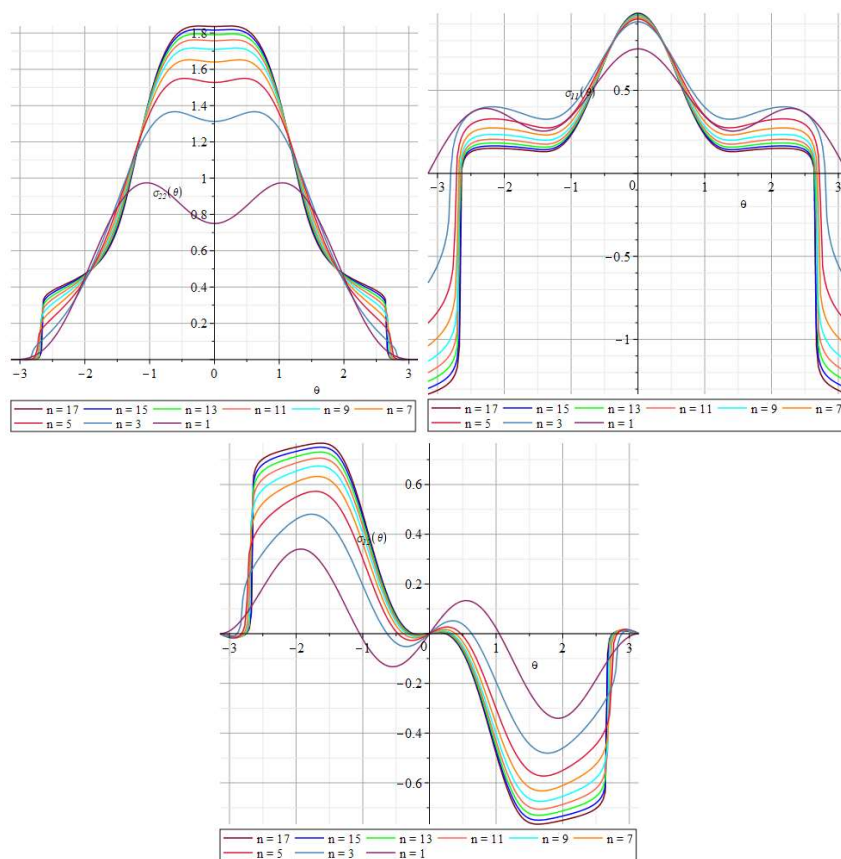


Рисунок 1 – Распределение компонент σ_{22} , σ_{11} , σ_{12} для различных значений параметра упрочнения n

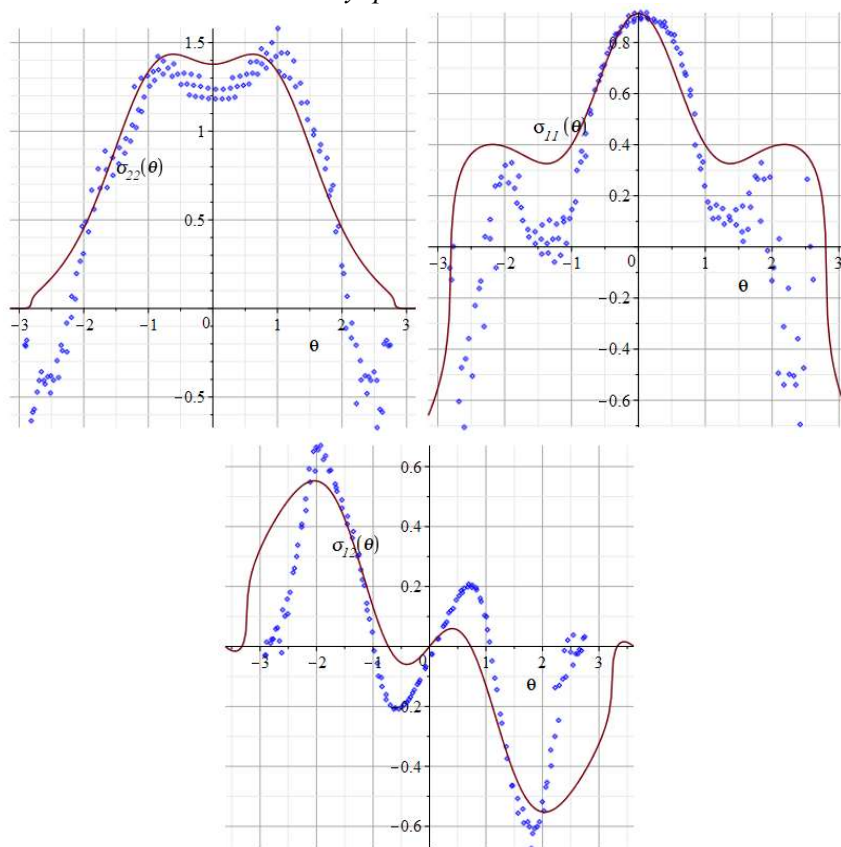


Рисунок 2 – Сравнительное распределение компонент σ_{22} , σ_{11} , σ_{12}

При проведении атомистического моделирования с учетом условий пластического течения меди при температуре 300 К наблюдается отсутствие сходимости с решением Хатчинсона-Райса-Розенгрена, что обусловлено комплексом фундаментальных факторов. Во-первых, существенное влияние оказывают тепловые флуктуации при моделируемой температуре 300 К, которые принципиально не учитываются в континуальном, но играют важную роль в атомистическом моделировании, вызывая стохастические вариации в поведении дислокаций. Во-вторых, дискретная природа кристаллической решетки в атомистических расчетах принципиально отличается от континуального приближения, что особенно заметно в зонах концентрации напряжений вблизи вершины трещины. Всё это приводит к активации дислокационных процессов и преждевременному затуплению вершины трещины.

Библиографический список

1. Hutchinson, J.W. (1968). Singular behaviour at the end of a tensile crack in a hardening material / J.W. Hutchinson // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1968. – Vol. 16 (1). – P. 13–31.
2. Степанова, Л.В. Математические методы механики разрушения / Л.В. Степанова. – М.: Физматлит, 2009. – 336 с.
3. Степанова, Л.В. Атомистическое и континуальное определение полей напряжений у вершины трещины в анизотропных средах с кубической сингонией / Л.В. Степанова, К.А. Мушанкова // *Проблемы прочности и пластичности*. – 2024. – Т. 86, № 1. – С. 15–25. – DOI: 10.32326/1814-9146-2024-86-1-15-25.