

УДК 539.3+539.4

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ ВЗАИМОСВЯЗИ МЕЖДУ ОТКОЛЬНОЙ ПРОЧНОСТЬЮ И СКОРОСТЬЮ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

© 2006 г. Д. А. Индейцев, А. М. Кривцов, П. В. Ткачев

Представлено академиком В.Е. Фортовым 15.03.2005 г.

Поступило 12.09.2005 г.

Эксперименты по откольному разрушению пластин позволяют исследовать прочностные свойства материалов в широком диапазоне скоростей деформирования [1]. Характерной особенностью подобных экспериментов является возможность создавать в материалах чрезвычайно высокие напряжения при простейшем одноосном деформировании, что делает их незаменимыми для тестирования аналитических и численных моделей высокоскоростного разрушения твердых тел. Перспективным подходом к моделированию откольного разрушения является использование метода динамики частиц (молекулярной динамики), согласно которому материал представляется в виде совокупности взаимодействующих частиц (атомов), движущихся согласно классическим уравнениям динамики. Подобная дискретная модель позволяет, с одной стороны, учитывать особенности поведения вещества на микроуровне, а с другой стороны, при достаточно большом числе частиц она может быть использована для верификации и тестирования континуальных моделей среды [2–7]. В классической молекулярной динамике частицы представляют собой атомы вещества, в методе динамики частиц они могут отождествляться и с другими структурными элементами (например, зёрнами материала) или использоваться как своеобразные конечные элементы – дискретные носители свойств среды.

Известно, что откольная прочность материалов возрастает с увеличением скорости деформирования [1]. В данной работе этот эффект исследуется с помощью метода динамики частиц и осуществляется сравнение с результатами натуральных экспериментов [1]. Компьютерная модель эксперимента по откольному разрушению изображена на рис. 1а. Имеются два прямоугольника, заполненных одинаковыми частицами – ударник и ми-

шень (рассматривается двухмерная постановка задачи). Взаимодействие частиц осуществляется посредством 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. 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

$$M \ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1}^N \frac{f(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|)}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n), \quad (2)$$

где \mathbf{r}_k – радиус-вектор k -й частицы, M – масса частицы, N – общее число частиц, $f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r)$ – 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 [6, 7].

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 (рис. 1б).

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 скорости ударника, при-

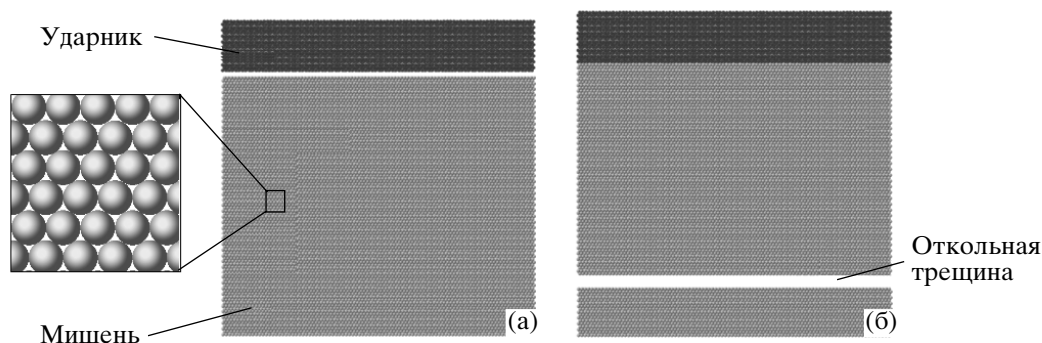


Рис. 1. Схема компьютерного эксперимента: а – начальное состояние образца, б – образец после откола.

водящей к отколу – откольная скорость v_* . В качестве масштаба скорости удобно выбрать скорость диссоциации

$$v_d^{\text{def}} = \sqrt{\frac{2D}{M}}, \quad (3)$$

представляющую собой минимальную скорость, которую надо сообщить частице массы M , находящейся в равновесии в потенциальном поле (1), чтобы она могла уйти на бесконечность.

Результаты моделирования представлены на рис. 2 (расчеты проведены для образца, содержащего 10^4 частиц). Показана зависимость логарифма безразмерной откольной скорости $\frac{v_*}{v_d}$ от логарифма обратной толщины ударника (N – число слоев в ударнике) и соответствующая линия тренда. Полученная зависимость может быть аппроксимирована соотношением

$$\frac{v_*}{v_d} = B \left(\frac{1}{N} \right)^m, \quad B = 1.7, \quad m = 0.16. \quad (4)$$

где B и m – безразмерные коэффициенты.

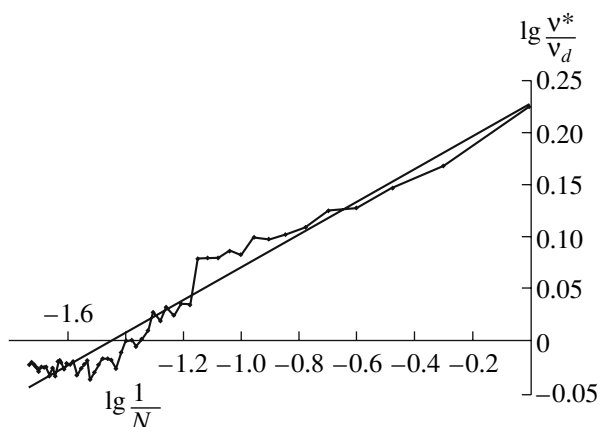


Рис. 2. Зависимость относительной откольной скорости от обратной толщины ударника (компьютерное моделирование).

Сравним полученные результаты с экспериментальными зависимостями откольной прочности от скорости деформирования, представленными в монографии [1]. На рис. 3 воспроизведены экспериментальные зависимости [1, рис. 5.19] для титана и нержавеющей стали. В качестве величины, характеризующей временную зависимость откольной прочности σ_* , используется скорость деформирования в разгрузочной части падающего импульса $\dot{\epsilon}^{\text{def}} = \frac{\dot{V}}{V_0}$, где V – удельный объем среды. По осям отложены десятичные логарифмы от откольной прочности σ_* и скорости деформирования $\dot{\epsilon}$, отнесенных соответственно к ГПа и с^{-1} . Экспериментальные зависимости могут быть аппроксимированы соотношением [1]

$$\sigma_* = A \left(\frac{\dot{V}}{V_0} \right)^m, \quad (5)$$

где A – размерный коэффициент, m – безразмерный показатель степени. На рис. 2 зависимости (5)

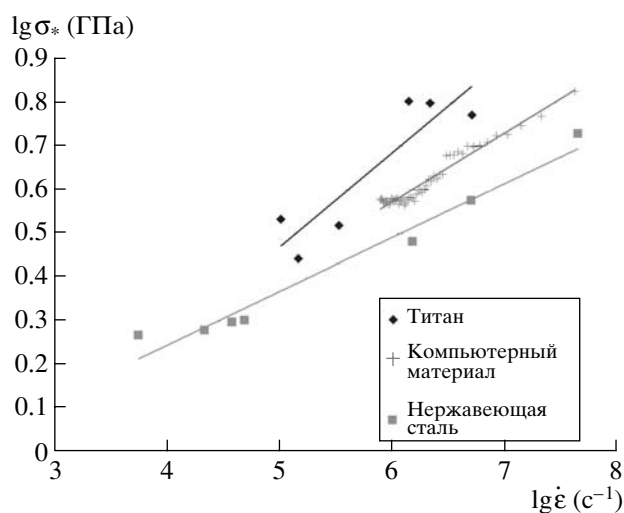


Рис. 3. Сравнение зависимостей откольной прочности от скорости деформирования, полученных из натуральных экспериментов [1] и компьютерного моделирования.

изображены в виде линий тренда. Кроме экспериментальных зависимостей, на график перенесены результаты компьютерного эксперимента (рис. 3). Сделано это в предположении, что откольная скорость v_* пропорциональна* откольной прочности

σ_* , а обратная толщина ударника $\frac{1}{N}$ пропорциональна скорости деформирования $\frac{\dot{V}}{V_0}$. Это позво-

ляет описать результаты компьютерного эксперимента формулой (5), причем показатель степени m должен быть одинаков в зависимостях (4) и (5). В табл. 1 представлены сравнительные значения показателя m для компьютерного и реальных материалов [1]. Из табл. 1 видно, что значение m для компьютерного материала находится между значениями для нержавеющей стали и высококчистого титана. Напомним, что для компьютерного материала использовался потенциал Леннард-Джонса (1), имеющий только два параметра – равновесное расстояние a и энергию связи D . Выбор данных параметров позволяет смещать зависимость прочности от скорости деформирования на рис. 3 вдоль горизонтальной и вертикальной осей соответственно, однако никак не влияет на наклон линии тренда – значение показателя m , являющегося константой для материала Леннард-Джонса.

Таким образом, рассматриваемый компьютерный материал при откольном разрушении обнаруживает свойства, близкие к свойствам реальных материалов: зависимость откольной прочности от скорости деформирования описывается аналогичной зависимостью, значение параметра наклона для которой находится между значениями для нержавеющей стали и высококчистого титана (табл. 1). Отметим, что эти результаты получены для простейшего компьютерного материала, представляющего собой плотную упаковку частиц, взаимодействующих по закону Леннард-Джонса. Плотная упаковка лучше подходит для описания монокристаллических материалов, однако, как следует из экспериментов, различие между поли- и монокристаллическими материалами выражается в основном в значении размерного коэффициента A , мало влияя на значение

*Для определения коэффициентов пропорциональности скорость деформирования в компьютерном материале рассчитывали при $a = 10^{-5}$ м (что соответствует приблизительно размеру зерна для ряда металлов); параметр D потенциала Леннард-Джонса (1) подбирали так, чтобы значение A для компьютерного материала равнялось среднему между значениями A для титана и нержавеющей стали.

Таблица 1. Значения показателя m , характеризующего степень зависимости откольной прочности от скорости деформирования, для различных металлов и компьютерного материала

Материал	m
Титан ВТ6	0.09
Сталь нержавеющая X18H10T	0.11
Компьютерный материал Леннард-Джонса	0.16
Титан высокочистый	0.19
Медь	0.20
Алюминий АМг6М	0.21

показателя m , характеризующего степень зависимости откольной прочности от скорости деформирования (см., например, рис. 5.28 из [1]). Потенциал Леннард-Джонса является классическим для задач молекулярной динамики и используется обычно при рассмотрении общих свойств твердых тел в случае, когда основной интерес представляет качественное описание, а не количественное совпадение результатов. Однако, как видно из приведенных результатов, он позволяет получить приемлемое соответствие с экспериментальными данными. Для более точных расчетов могут быть использованы потенциалы, содержащие большее число параметров [8] и позволяющие тем самым получить лучшую корреляцию со свойствами конкретных материалов.

Авторы благодарны Н.Ф. Морозову за полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 05-01-00094.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортнов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. 1996. М.: "Янус-К". 406 с.
2. Holian B.L. // Shock Waves. 1995. V. 5. № 3. P. 149–157.
3. Abraham F.F., Walkup R., Gao H. et al. // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 2002. V. 99. № 9. P. 5783–5787.
4. Krivtsov A.M. // Intern. J. Impact Eng. 1999. V. 23. P. 477–487.
5. Головнева Е.И., Головнев И.Ф., Фомин В.М. // Физ. мезомеханика. 2003, Т. 6. В. 2. С. 39–48.
6. Кривцов А.М. // ФТТ. 2004. Т. 46. В. 6. С. 64–69.
7. Кривцов А.М., Мясников В.П. // Изв. РАН. МТТ. 2005. № 1. С. 87–102.
8. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. // Дальневосточный мат. журн. 2002. Т. 3. № 2. С. 254–276.