

ТКАЧЕВ ПАВЕЛ ВИКТОРОВИЧ

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ИДЕАЛЬНОГО КРИСТАЛЛА ПРИ СИЛЬНОМ СТАТИЧЕСКОМ
И ДИНАМИЧЕСКОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ**

Специальность: 01.02.04 — механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

**Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального обучения
«Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»**

- Научный руководитель** — доктор физико-математических наук, профессор Кривцов Антон Мирославович
- Официальные оппоненты** — Мельников Борис Евгеньевич,
доктор технических наук, профессор
- Семенов Борис Николаевич,
кандидат физико-математических наук, доцент
- Ведущая организация** — ФГБОУ ВПО «Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д. Ф. Устинова» (Санкт-Петербург)

Защита состоится «23» октября 2013 г. в 16.00 на заседании диссертационного совета Д 212.229.05 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет» по адресу:
195251, г.Санкт-Петербург, ул.Политехническая, д.29, II уч.корп., ауд.265.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет».

Автореферат разослан «20» сентября 2013 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета

Воробьева Татьяна Владимировна

Актуальность темы. Необходимость эксплуатации машин и механизмов при воздействии больших статических и динамических нагрузок требует исследования поведения материала при сильном деформировании. Для решения подобных задач наиболее разработанной в механике деформируемого твёрдого тела является концепция непрерывности, в рамках которой материал представляется в виде сплошной среды. При данном подходе в случае упругого деформирования влиянием внутренней структуры материала можно пренебречь, однако описание неупругого деформирования зачастую требует учёта её влияния на характер протекающих процессов и свойства вещества. Эта необходимость возникает в силу того, что неупругое деформирование, как правило, сопровождается изменением структуры вещества, а при сильном деформировании происходит разрушение, которое фактически является нарушением сплошности материала. Одним из способов введения информации о поведении структурных элементов материала в рассматриваемую модель является математический переход от уравнений, описывающих микроструктуру, к уравнениям сплошной среды, содержащим информацию о строении, свойствах и поведении структурных элементов.

Длительное воздействие сильной статической нагрузки зачастую приводит к разрушению, одной из причин которого является потеря устойчивости внутренней структуры материала. Поэтому исследование поведения микроструктуры при сильном статическом деформировании и получение критерия её устойчивости является важным звеном для понимания общей картины разрушения и предсказания поведения конструкций при эксплуатации в условиях критических нагрузок. Одним из типов конструкционных материалов являются металлы, обладающие кристаллической решёткой. Использование модели идеального кристалла для их описания позволяет аналитически определить прочностные характеристики в рамках нелинейной теории. Для теоретического анализа деформирования кристаллических твёрдых тел необходимо получение соотношений, связывающих параметры микроструктуры с макроскопическими параметрами деформирования. Переход от уравнений, описывающих внутреннюю структуру вещества, к уравнениям сплошной среды позволяет использовать разработанный понятийный и математический аппарат механики сплошных сред, при этом сохранив информацию о строении и свойствах микроструктуры. Полученные в результате аналитические соотношения также могут использоваться для постановки задач компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения, а также для верификации результатов компьютерного эксперимента в случаях, когда задача может быть решена как аналитически, так и численно.

Частой причиной разрушения материала при его эксплуатации в экстремальных условиях является сильное динамическое деформирование. В частности, такие его виды, как высокоскоростной удар, взрыв, а также другие импульсные нагрузки. Уникальную возможность изучения прочностных свойств твёрдого тела при подобного рода деформировании дают эксперименты с плоскими ударными волнами, так как в материале создаются чрезвычайно высокие напряжения при простейшем одноосном деформировании. Для исследования ударного взаимодействия и сопротивления металлов сильному динамическому

деформированию компьютерное моделирование такого рода взаимодействий на примере идеального монокристалла является прекрасной моделью, на которой можно проверить исходные теоретические положения, а также провести сравнение с данными натуральных экспериментов. Это позволяет исследовать напряжения и скорость деформирования при ударном нагружении, оценив степень влияния микроструктуры на протекающие процессы, а также подобрать значения параметров компьютерного материала, соответствующие свойствам реальных материалов, для последующего их использования при моделировании более сложных видов динамического деформирования.

Таким образом, определение прочностных характеристик идеального кристалла при сильном статическом и динамическом деформировании является актуальной проблемой современной механики деформируемого твёрдого тела.

Методика исследования. Основным методом исследования, используемым в данной диссертационной работе как для аналитических выкладок, так и для компьютерного моделирования, является метод механики дискретных сред. Он состоит в представлении вещества в виде совокупности взаимодействующих частиц (материальных точек или твёрдых тел), поведение которых описывается законами классической механики. Силы взаимодействия между частицами определяются посредством потенциалов взаимодействия, которые на сегодняшний день для важнейших материалов хорошо известны. Для аналитического определения прочностных характеристик при сильном статическом деформировании и получения критерия потери устойчивости внутренней структуры материала используется подход, позволяющий совершить переход от уравнений, описывающих микроструктуру материала, к уравнениям механики сплошных сред. Он основан на длинноволновом приближении и потому анализ производится без учёта теплового движения. В качестве метода компьютерного моделирования для определения прочностных характеристик при сильном динамическом деформировании, выбран метод динамики частиц. В основе данного подхода лежит представление твёрдого тела в виде различных упаковок частиц, из которых монокристаллические являются наиболее широко используемыми. Он позволяет исследовать напряжения и скорость деформирования при ударном нагружении, оценив степень влияния микроструктуры на протекающие процессы.

Цель работы. Целью данной работы является разработка подходов к определению прочностных характеристик идеального кристалла при сильном статическом и динамическом деформировании для различных видов взаимодействия между частицами, образующими кристаллическую решётку.

Научную новизну работы составляют следующие **результаты, выносимые на защиту**:

1. Получен критерий устойчивости для идеальной бесконечной плоской плотноупакованной кристаллической решётки при наложении малой деформации на конечную деформацию.
2. Построены области устойчивости однородной деформации идеальной бесконечной плоской плотноупакованной кристаллической решётки в поле парного потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса.

3. Развита методика для численного определения зависимости откольной прочности от скорости деформирования для идеальных кристаллов.
4. Построены зависимости параметров, характеризующих откольное разрушение ряда металлов от параметров парных потенциалов взаимодействия Леннарда-Джонса и Морзе.

Достоверность полученных результатов. Достоверность результатов достигается использованием апробированных физических моделей и применением строгих математических методов, сравнением результатов аналитических исследований и численных расчётов с экспериментальными данными, применением современных методов и вычислительных средств, известных методик моделирования, использованием при вычислении тестовых моделей, допускающих точное аналитическое решение.

Практическая значимость работы. Полученный критерий устойчивости для кристаллической решётки позволяет определить значения деформации, при котором наступает нарушение внутренней структуры материала. Подход позволяет подойти к описанию разрушения с позиции теории устойчивости и получить аналитические формулы, описывающие границу деформации, за которой возможно наступление разрушения. Найденные значения параметров потенциала взаимодействия для ряда металлов могут быть применены при компьютерном моделировании откольного разрушения, что позволяет заменить дорогостоящие натурные эксперименты. Полученные результаты в области статического нагружения и откольного разрушения могут быть использованы для прогноза поведения материала и конструкций, находящихся под воздействием критических нагрузок.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались на семинарах кафедры «Теоретическая механика» СПбГПУ, Института проблем машиноведения РАН (Санкт-Петербург), а также на всероссийских и международных конференциях «Advanced Problems in Mechanics» (Санкт-Петербург, 2002, 2003, 2004, 2005), IX Всероссийское совещание по проблемам построения сеток для решения задач математической физики, посвященное памяти академика А.Ф. Сидорова (Абрау-Дюрсо, 2002), II Всероссийская школа-конференция «Актуальные проблемы прикладной математики и механики», посвященная памяти академика А.Ф. Сидорова (Абрау-Дюрсо, 2004), 21st International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (Poland, Warsaw, 2004).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 11 работ, в том числе 3 статьи в изданиях из перечня ВАК. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, двух глав и заключения. Работа содержит 109 страниц, 22 рисунка, 4 таблицы, список литературы содержит 169 наименований.

Во введении дана общая характеристика работы, обоснована её актуальность, приведён обзор литературы, изложена методика исследования, перечислены основные результаты, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена развитию подхода, позволяющего определять устойчивость бесконечной идеальной плотноупакованной кристаллической решётки при сильном статическом деформировании. Обсуждаются допущения, которые необходимо сделать для поиска аналитического критерия устойчивости. Проводится анализ деформированного состояния в рамках нелинейной теории упругости. Выводится условие устойчивости путём наложения малой деформации на конечную. Находится критерий устойчивости для бесконечной одномерной цепочки частиц в поле парного потенциала взаимодействия. Находятся условия устойчивости для однородного деформирования идеального бесконечного плоского плотноупакованного монокристалла с учётом первой координационной сферы в поле парного потенциала взаимодействия. Строится область устойчивости по найденному критерию для потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса.

Первая глава состоит из восьми параграфов. В **пункте 1.1** приводится описание объекта исследования, которым являются процессы, происходящие в телах с микроструктурой. Вводится понятие кристаллической решётки верное для пространства произвольной размерности. Определяется простая и сложная кристаллические решётки. Раскрывается понятие элементарной ячейки для частиц, находящихся внутри решётки и на её границах.

В **пункте 1.1.1** вводятся основные гипотезы, используемые для перехода от дискретной системы, описываемой кристаллической решёткой, к эквивалентной сплошной среде. Рассматриваются идеальные бесконечные монокристаллы простой структуры. Между частицами, образующими кристаллическую решётку, действуют силы, образованные парным центральным взаимодействием, быстро убывающие на расстоянии. Для перехода к эквивалентному континууму используется длинноволновое приближение, поэтому все дальнейшие рассуждения проводятся без рассмотрения теплового движения.

В **пункте 1.1.2** излагаются особенности описания отсчётной (недеформированной) и актуальной (деформированной) конфигурации решётки. Вводится специальная нумерация частиц в кристалле, позволяющая учесть его симметрию. Исходной частице даётся номер 0, а всем её соседям номер α . Вводятся радиус-векторы для частицы с номером α в отсчётной конфигурации — \underline{r}_α , и в актуальной — \underline{R}_α ; а также векторы \underline{a}_α и \underline{A}_α , соединяющие исходную частицу с её соседями с номерами α в отсчётной и актуальной конфигурации соответственно. Присвоение индексов α производится таким образом, чтобы выполнялось тождество $\underline{a}_\alpha = -\underline{a}_{-\alpha}$. Также вводится объём элементарной ячейки и оператор Гамильтона, которые в отсчётной конфигурации записываются соответственно v и $\overset{\circ}{\nabla}$, а в актуальной V и ∇ .

В **параграфе 1.1.3** в качестве силы взаимодействия между частицами выбирается сила, порождённая парным потенциалом взаимодействия $\Pi(r)$, зависящим только от расстояния между частицами. Вводятся соответствующие ему сила взаимодействия $f(r)$ и жёсткость $c(r)$, как соответственно первая производная взятая с обратным знаком и вторая производная от потенциала взаимодействия. Вводятся расстояния σ , a и b , на которых обращается в ноль, соответственно, потенциал и образованные из него сила и жёсткость. Далее рассматриваются только потенциалы, для которых $\sigma < a < b$. Основное их свой-

ство состоит в том, что при приближении ($r < a$) частицы отталкиваются, при удалении ($r > a$) — притягиваются, причём при ($r > b$) потенциал стремится к нулю. Вводятся энергия связи $D = |\Pi(a)|$ и прочность связи $f_* = |f(b)|$.

В пункте 1.2 вводятся дополнительные обозначения, используемые в аналитических выкладках.

В пункте 1.2.1 вводится обозначение для векторных и тензорных величин, а также основные правила действий между ними. Во всех последующих математических построениях используется язык прямого тензорного исчисления.

В пункте 1.2.2 вводятся дополнительные обозначения, используемые для сокращения дальнейшей записи формул. Сила взаимодействия между частицами в актуальной конфигурации обозначена F_α , жёсткость связи в отсчётной и актуальной конфигурациях обозначены соответственно c_α и C_α . Вводятся удобные в вкладки тензоры $\underline{\underline{A}}_\alpha \equiv \underline{A}_\alpha \underline{A}_\alpha$, ${}^4\underline{\underline{A}}_\alpha \equiv \underline{A}_\alpha \underline{A}_\alpha \underline{A}_\alpha \underline{A}_\alpha$, $\underline{a}_\alpha \equiv \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha$, ${}^4\underline{a}_\alpha \equiv \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha$. Также для сокращения записи выкладок далее опускается индекс 0 в обозначении радиус-векторов и вектора перемещения. Вводятся скалярные величины $\mathcal{A}_\alpha \equiv -\frac{F_\alpha}{A_\alpha}$, $\mathcal{B}_\alpha \equiv \frac{1}{A_\alpha^2} (C_\alpha - \mathcal{A}_\alpha)$ и тензоры $\underline{\underline{A}} \equiv \frac{1}{2} \sum_\alpha \mathcal{A}_\alpha \underline{\underline{A}}_\alpha$, ${}^4\underline{\underline{B}} \equiv \frac{1}{2} \sum_\alpha \mathcal{B}_\alpha {}^4\underline{\underline{A}}_\alpha$, ${}^4\underline{\underline{C}} \equiv \underline{\underline{E}} \underline{\underline{A}} + {}^4\underline{\underline{B}}$. Вводятся в рассмотрение девиатор вектора перемещений $\underline{\underline{\kappa}} \equiv (\nabla \underline{u})$ и его симметричная часть $\underline{\underline{\varepsilon}} \equiv (\nabla \underline{u})^S$.

В пункте 1.3 описывается конечная деформация кристаллической решётки при сильном статическом деформировании в рамках нелинейной теории упругости.

В пункте 1.3.1 для описания деформированного состояния записывается динамическое уравнение в форме Пиола. Динамическая составляющая требуется для последующего исследования устойчивости статического состояния динамическим критерием. В исходном уравнении пренебрегается влиянием объёмных массовых сил, а также делается переход от плотности к массе частицы. Итоговое уравнение имеет вид $\frac{1}{v} M \ddot{\underline{u}} = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \underline{\underline{P}}$.

В пункте 1.3.2 применяется длинноволновое приближение, в результате связь между векторами положения частиц в актуальной и отсчётной конфигурации принимает вид $\underline{A}_\alpha \approx \underline{a}_\alpha \cdot \left(\overset{\circ}{\nabla} \underline{R} \right)$, а тензор напряжений Пиола имеет следующее представление $\underline{\underline{P}} = \frac{1}{2v} \sum_\alpha \mathcal{A}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{A}_\alpha$.

В пункте 1.4 производится наложение произвольной малой деформации кристаллической решётки на её конечную деформацию. В качестве отсчётной конфигурации рассматривается деформированное состояние кристаллической решётки, а в качестве актуальной — его произвольное малое приращение. Итоговое уравнение в вариациях принимает вид $\frac{1}{v} M \ddot{\underline{u}} = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \delta \underline{\underline{P}}$.

В пункте 1.4.1 проводится вычисление вариации тензора напряжений Пиола $\delta P = \frac{1}{2v} \left[\sum_\alpha \mathcal{B}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{A}_\alpha \underline{\underline{A}}_\alpha \cdot \underline{\underline{\kappa}} + \sum_\alpha \mathcal{A}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{A}_\alpha \cdot \underline{\underline{\kappa}} \right]$.

В пункте 1.4.2 записывается окончательный вид возмущённого уравнения Пиола $M \ddot{\underline{u}} = {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \cdot \cdot (\nabla \nabla \underline{u})$.

В **пункте 1.5** анализируется устойчивость возмущённого уравнения движения в форме Пиола.

В **пункте 1.5.1** ищется решение в виде бегущей волны с частотой ω , волновым вектором $\underline{\mathcal{K}}$ и вектором амплитуды \underline{u}_0 : $\underline{u} = \underline{u}_0 e^{i\omega t} e^{i\underline{\mathcal{K}} \cdot \underline{R}}$. Далее вводятся обозначения $\underline{\underline{\mathcal{K}}} = \underline{\mathcal{K}}\underline{\mathcal{K}}$, $\Omega = M\omega^2$, $\underline{\underline{D}} = {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}$. В итоге анализ устойчивости сводится к поиску корней дисперсионного соотношения, получаемого из равенства нулю определителя $\det [\underline{\underline{D}} - \Omega \underline{\underline{E}}] = 0$.

В **пункте 1.5.2** формулируется критерий устойчивости $\text{Im}(\omega) = 0$, что эквивалентно требованию вещественности и положительности Ω . Это говорит о том, что структура материала является устойчивой в волновом смысле, если возмущённое уравнение движения имеет волновое решение, в котором нет экспоненциального роста амплитуды.

В **пункте 1.6** применяется полученный критерий устойчивости для одномерной и двумерной кристаллических решёток.

В **пункте 1.6.1** показывается, что одномерная бесконечная цепочка, при учёте влияния только ближайших, соседей является устойчивой при положительной жёсткости. При учёте влияния произвольного числа соседей критерий устойчивости имеет вид $\sum_{\alpha} A_{\alpha}^2 C_{\alpha} > 0$.

В **пункте 1.6.2** проводится анализ устойчивости плоской плотноупакованной кристаллической решётки в поле однородной деформации. Для плоской кристаллической решётки дисперсионное соотношение принимает вид $\Omega^2 - \Omega \text{tr} \underline{\underline{D}} + \det \underline{\underline{D}} = 0$, положительность и вещественность корней которого гарантирует следующая система неравенств

$$\begin{cases} \text{tr} \underline{\underline{D}} > 0 \\ \det \underline{\underline{D}} > 0 \end{cases} \quad (1)$$

В **пункте 1.7** строится область устойчивости однородной деформации плоской плотноупакованной кристаллической решётки с учётом первой координационной сферы.

В **пункте 1.7.1** выводится критерий устойчивости для данного случая, который принимает вид

$$\begin{cases} \sum_{\alpha>0} [(\mathcal{A}_{\alpha} + C_{\alpha}) \underline{\underline{A}}_{\alpha} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}] > 0 \\ \det \sum_{\alpha>0} [(\mathcal{A}_{\alpha} \underline{\underline{E}} + \mathcal{B}_{\alpha} \underline{\underline{A}}_{\alpha}) \underline{\underline{A}}_{\alpha} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}] > 0 \end{cases} \quad (2)$$

В **пункте 1.7.2** для построения области устойчивости в качестве силы взаимодействия между частицами используется сила, порождённая потенциалом Леннарда-Джонса

$$P(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (3)$$

где D — энергия связи, a — равновесное расстояние между частицами. Поскольку нас интересует качественное поведение кристаллической решётки при деформировании, то выбраны оба этих параметра равными единице. В качестве осей для диаграммы устойчивости выбирается ε_1 — величина деформации

вдоль орта \underline{i} , а ε_2 — величина деформации вдоль орта \underline{j} декартовой системы координат. Итоговая область устойчивости имеет вид, изображённый на Рис. 1. Закрашенная область — это та деформация, при которой кристаллическая ре-

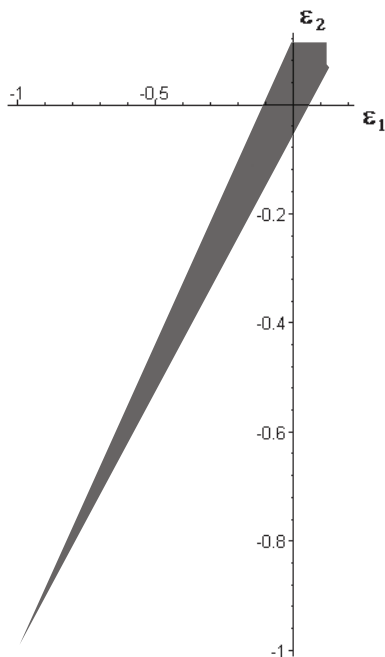


Рис. 1: Область устойчивости однородной деформации плоской кристаллической решётки в поле парного потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса.

шётка является устойчивой. Из рисунка видно, что материал на сжатие является более прочным, чем на растяжение. Также можно предположить, что на растяжение происходит разрушение, так как расстояние потери устойчивости соответствует расстоянию разрыва связей.

В пункте 1.8 сформулированы основные выводы Главы 1.

Вторая глава посвящена развитию подхода для определения параметров потенциалов Леннарда-Джонса и Морзе, которые удовлетворяют откольным свойствам некоторых металлов. Обсуждается возможность сопоставления прочностных характеристик откольного разрушения, полученных из натурального эксперимента, с результатами компьютерного моделирования методом динамики частиц. Проводится анализ влияния на картину разрушения компьютерного образца свободных и периодических граничных условий. Приводятся результаты компьютерных экспериментов по откольному разрушению с использованием потенциалов взаимодействия Леннарда-Джонса и Морзе. Находятся параметры откольного разрушения для материала Леннарда-Джонса и проводится их сопоставление со значениями для металлов, полученными из натурального эксперимента. Для материала Морзе находятся значения параметров потенциала, позволяющие удовлетворить откольным свойствам некоторых металлов.

Вторая глава состоит из восьми параграфов. В пункте 2.1 приводится описание объекта исследования, которым являются процессы, происходящие в металлах при ударном взаимодействии. Приводится обоснование возможности применения метода динамики частиц для компьютерного моделирования подобных процессов.

В пункте 2.1.1 формулируется макроскопическая постановка задачи откольного разрушения при плоском ударном взаимодействии двух пластин: начальные условия изображены на Рис.2–а; вид образца после ударного взаимодействия изображён на Рис.2–б.

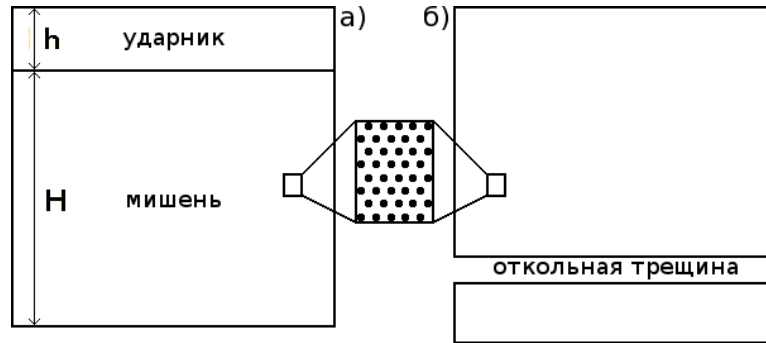


Рис. 2: Схема компьютерного эксперимента: а – начальное состояние образца, б – образец после откола. На рисунке h и H – толщина ударника и мишени соответственно. В центральном прямоугольнике показана увеличенная структура материала, используемая при моделировании.

В пункте 2.1.2 формулируется постановка задачи на микроуровне, результаты компьютерного эксперимента будут получены для двух ориентаций плоской кристаллической решётки: горизонтальной (Рис.3–а) и вертикальной (Рис.3–б).

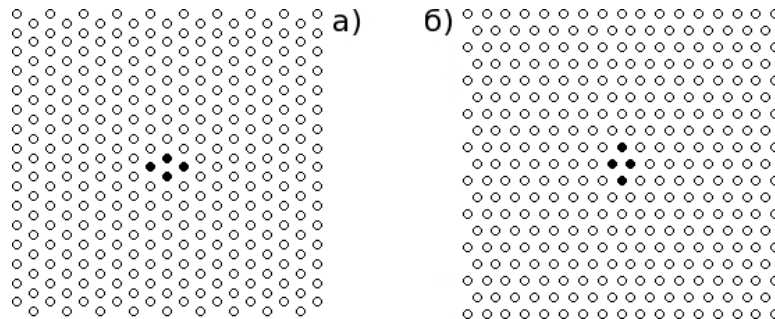


Рис. 3: Ориентация кристаллической решётки: а – горизонтальная; б – вертикальная.

В пункте 2.2 описывается метод исследования, в качестве которого выбран метод динамики частиц. В нём материал представляется, как совокупность из N взаимодействующих материальных точек (частиц), уравнения движения которых имеют вид

$$M\ddot{\underline{r}}_k = \sum_{n=1}^N \Phi(r_{kn}) \underline{r}_{kn}, \quad (4)$$

где \underline{r}_k – вектор положения k -ой частицы.

$$\underline{r}_{kn} = \underline{r}_k - \underline{r}_n, \quad r_{kn} = |\underline{r}_{kn}|, \quad (5)$$

M – масса частицы, $\Phi(r)$ описывает взаимодействие между частицами. В уравнениях (4) учитывается только парное взаимодействие между частицами. $\Phi(r)$,

представляющее собой консервативное взаимодействие, определяется следующим образом:

$$\Phi(r) = \frac{1}{r} f(r), \quad f(r) = -\Pi'(r), \quad (6)$$

где $f(r)$ — скалярная сила взаимодействия между частицами, $\Pi(r)$ — потенциал взаимодействия.

В пункте 2.2.1 обосновывается в качестве метода интегрирования уравнений движения (4) метод центральных разностей (метод Виньярда), являющийся разновидностью алгоритма Верле

$$\begin{aligned} \underline{v} \left(t + \frac{1}{2}\tau \right) &= \underline{v} \left(t - \frac{1}{2}\tau \right) + \underline{\omega}(t) \tau, \\ \underline{r}(t + \tau) &= \underline{r}(t) + \underline{v} \left(t + \frac{1}{2}\tau \right) \tau. \end{aligned} \quad (7)$$

В пункте 2.3 описаны основные свойства парных потенциалов взаимодействия и введены безразмерные параметры для их сравнения. Рассмотрены используемые в данной работе для моделирования откольного разрушения двухпараметрический потенциал Леннарда-Джонса (3) и трёхпараметрический потенциал Морзе

$$\Pi(r) = D \left[e^{-2\kappa\left(\frac{r}{a}-1\right)} - 2e^{-\kappa\left(\frac{r}{a}-1\right)} \right], \quad (8)$$

где кроме D и a , характеризующих энергию связи и равновесное расстояние, существует безразмерный параметр κ , характеризующий ширину потенциальной ямы. Показано, что при $\kappa = 6$ достигается равенство для потенциалов Леннарда-Джонса и Морзе трёх важнейших размерных параметров: равновесного расстояния a , жёсткости связи C и энергии связи D .

В пункте 2.4 описана схема эксперимента, в которой путём многократных компьютерных экспериментов находится откольная скорость v_* — это минимальная скорость ударника, при которой в мишени образуется откольная трещина, приводящая к отделению фрагмента (откольной пластины).

В пункте 2.5 описывается метод сравнения результатов компьютерного моделирования с данными натуральных экспериментов, в которых в качестве величины, характеризующей временную зависимость откольной прочности σ_* , используется скорость деформирования в разгрузочной части падающего импульса $\dot{\epsilon} = \dot{V}/V_0$, где V — удельный объем среды. Экспериментальные зависимости аппроксимируются соотношением

$$\sigma_* = A\dot{\epsilon}^m, \quad (9)$$

где A — размерный коэффициент, m — безразмерный показатель степени. Результаты компьютерного моделирования представляются по аналогии в виде

$$\frac{v_*}{v_d} = B \left(\frac{1}{N} \right)^m, \quad (10)$$

где v_* — откольная скорость, v_d — скорость диссоциации, N — число слоёв в ударнике, B — безразмерный коэффициент пропорциональности, m — безразмерный показатель степени.

В **пункте 2.5.1** определяется связь между коэффициентам входящими в (9) и (10). Так как формула (10) получена из (9) в предположении, что откольная прочность σ_* пропорциональна относительной откольной скорости v_*/v_d , а скорость деформирования $\dot{\epsilon}$ пропорциональна обратной толщине ударника $1/N$, то в этом случае значение показателя m , должно быть одинаковым для обеих формул — экспериментальной (9) и теоретической (10). Далее устанавливается, что связь между коэффициентами A и B имеет вид

$$A = \frac{1}{2} B \rho v_1^2 \frac{v_d}{v_1} \left(\frac{16\sqrt{3} \varepsilon_* v_2}{9 a} \right)^{-m}, \quad (11)$$

где v_d/v_1 и ε_* — известные константы для рассматриваемого компьютерного материала, в качестве скоростей v_1 и v_2 может быть взята скорость распространения продольных волн v_l и (или) объёмная скорость звука. Указанные скорости для трёхмерного случая определяются формулами

$$v_b = \sqrt{\frac{K}{\rho}} = \sqrt{\frac{\lambda + \frac{2}{3}\mu}{\rho}}, v_l = \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}\mu}{\rho}} = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}, \frac{v_l}{v_b} = \sqrt{3 \frac{1 - \nu}{1 + \nu}}. \quad (12)$$

здесь K — коэффициент всестороннего сжатия, λ и μ — коэффициенты Ляме, ν — коэффициент Пуассона.

В **пункте 2.5.2** определяются выражения для механических параметров компьютерного материала, что позволяет формулу (12) переписать в виде

$$A = k \rho v_l^{2-m} a^m. \quad (13)$$

Здесь k — безразмерный коэффициент, определяемый безразмерными параметрами компьютерного материала:

$$k = \frac{\sqrt{3} B}{2 k_v} \left(\frac{16\sqrt{3}}{9} \varepsilon_* \right)^{-m}, \quad (14)$$

где k_v и ε_* — безразмерные параметры потенциала взаимодействия между частицами; B — безразмерный параметр компьютерного материала, определяемый из компьютерного эксперимента; A , ρ и v_l — размерные параметры материала, определяемые из натурального эксперимента. Безразмерный параметр m определяется как из натурального, так и из компьютерного эксперимента, и согласование этих двух значений должно служить для выбора потенциала взаимодействия.

В **пункте 2.5.3** определяются параметры потенциала Леннарда-Джонса (3) из данных натурального эксперимента. При заданных a и M определяется энергия связи D по значению параметра A , тем самым устанавливается связь между потенциалом взаимодействия и откольной прочностью материала

$$D = M \left(\frac{A}{81k\rho} \left(\frac{a}{9} \right)^{-m} \right)^{\frac{1}{1-m/2}}. \quad (15)$$

В пункте 2.5.4 определяются параметры потенциала Морзе (8) из данных натурального эксперимента. Выражение для D при заданных a и M имеет вид

$$D = M \left(\frac{2A}{3k_0 \rho v_l^{1-m} a^m} \right)^2, \quad (16)$$

где

$$k_0 = \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\frac{16\sqrt{3}\ln 2}{9} \right)^{-m} B_0. \quad (17)$$

Коэффициент $B_0 = B\kappa^m$ устанавливается в предположении, что откольная скорость не изменяется, если произведение κN (N — число слоёв в ударнике) остаётся постоянным.

В пункте 2.6 описывается сложный характер поведения микроструктуры при моделировании откольного разрушения с использованием свободных граничных условий. Уже на скоростях в два раза меньших скорости диссоциации наблюдается движение дислокаций и локализация их в вакансии. Также откольная трещина возникает на скоростях меньших, чем происходит вылет откалывающегося фрагмента. Причиной такого сложного поведения микроструктуры при моделировании является наличие четырёх волн, движущихся внутри материала, идущих от свободных боковых границ и плоскости удара. Установлено влияние ориентации кристаллической решётки на характер разрушения: при ударе двух квадратных образцов в случае горизонтальной ориентации образуется шейка и происходит откол, тогда как при вертикальной ориентации происходит раскол образца.

В пункте 2.7 для исключения влияния эффектов, возникающих на боковых гранях, рассматривается ударное взаимодействие двух бесконечных в горизонтальном направлении пластин. Для моделирования бесконечности в горизонтальном направлении используются периодические граничные условия. В результате серии компьютерных экспериментов находятся значения относительной откольной скорости v_*/v_d для изменения толщины ударника от одного слоя частиц до половины толщины образца.

В пункте 2.7.1 исследуется сходимость результатов компьютерных экспериментов по числу частиц и по шагу интегрирования. Показывается близость результатов компьютерного моделирования при использовании периодических граничных условий для случая вертикальной и горизонтальной ориентации кристаллической решётки. При этом устанавливается, что вертикальная ориентация кристаллической решётки требует меньшее число частиц для достижения тех же значений, что и горизонтальная. Обосновывается выбор для дальнейшего моделирования 10000 частиц и вертикальной ориентации кристаллической решётки. Исследуется влияние шага интегрирования на результаты компьютерного моделирования. Определяется оптимальное значение шага интегрирования равным $0.01T_0$, где $T_0 = 2\pi\sqrt{\frac{M}{C}}$ — период колебаний массы M под действием линейной силы с жёсткостью C .

В пункте 2.7.2 приводятся результаты компьютерного моделирования откольного разрушения с использованием потенциала Леннарда-Джонса:

$$m = 0.16, \quad B = 1.7. \quad (18)$$

В пункте 2.7.3 приводятся результаты компьютерного моделирования откольного разрушения с использованием потенциала Морзе (Рис. 4), который является трёхпараметрическим и изменение безразмерного параметра κ позволяет влиять на наклон линии тренда (Рис. 5).

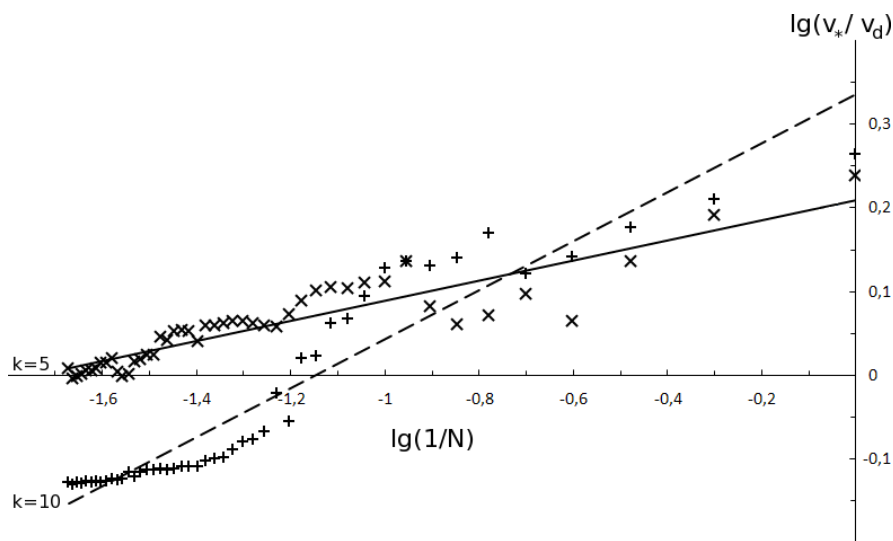


Рис. 4: Зависимость относительной откольной скорости от обратной толщины ударника при разных значениях κ потенциала Морзе. Знаками «крест» изображены результаты при $\kappa = 5$, сплошной линией изображена соответствующая им линия тренда. Знаками «плюс» изображены результаты при $\kappa = 10$, пунктирной линией изображена соответствующая им линия тренда.

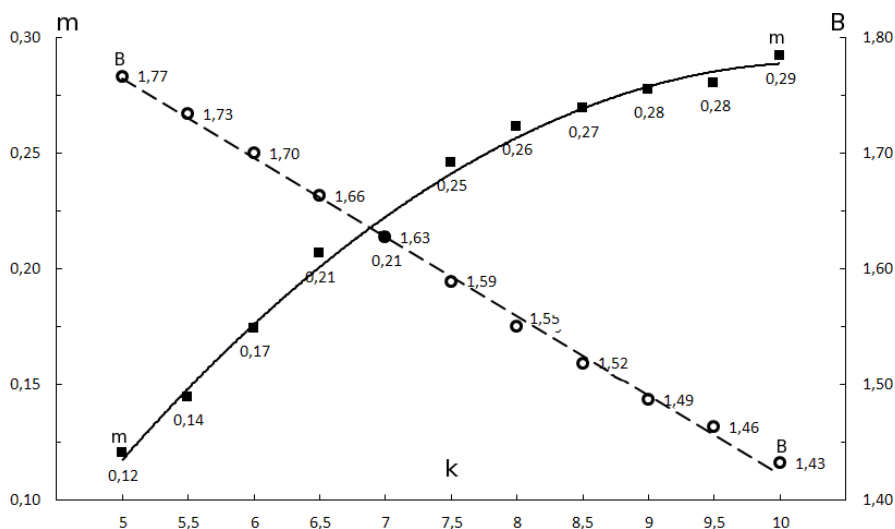


Рис. 5: Значения параметром m и B в зависимости от κ . Линиями проведены соответствующие линии тренда.

В пункте 2.7.4 проводится сравнение параметра m для компьютерного материала со значениями для некоторых металлов, результаты приведены в Таблице 1.

В пункте 2.9 сформулированы основные выводы главы 2.

Таблица 1: Значения показателя m , полученные из натуральных экспериментов для различных металлов, и соответствующие им параметры κ для компьютерного материала

Материал	m	κ
Сталь нержавеющая X18H10T	0.11	4.9
Компьютерный материал Леннарда-Джонса	0.16	6.0
Титан высокочистый	0.19	6.5
Медь	0.20	6.6
Алюминий Amr6M	0.21	7.0

В заключении сформулированы основные результаты работы

1. Получен критерий устойчивости для идеальной бесконечной плоской плотноупакованной кристаллической решётки при наложении малой деформации на конечную деформацию.
2. Построены области устойчивости однородной деформации идеальной бесконечной плоской плотноупакованной кристаллической решётки в поле парного потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса. Показана анизотропия свойств материала, в том числе различие критических деформаций при растяжении и сжатии.
3. Развита методика для численного определения зависимости откольной прочности от скорости деформирования для идеальных кристаллов. Данный подход основан на сравнении результатов компьютерного моделирования откольного разрушения с результатами натуральных экспериментов, что позволяет создавать компьютерные материалы для детального исследования процессов протекающих при сильном деформировании под действием импульсных нагрузок.
4. Построены зависимости параметров, характеризующих откольное разрушение от параметров парных потенциалов взаимодействия Леннарда-Джонса и Морзе. Показано, что откольные свойства компьютерного материала Леннарда-Джонса находятся между свойствами нержавеющей стали и высокочистым титаном. Использование трёхпараметрического потенциала Морзе позволило удовлетворить откольным свойствам ряда металлов: сталь нержавеющая X18H10T, титан высокочистый, медь, алюминий Amr6M.

Публикации по теме исследования

а) Публикации в изданиях, входящих в перечень ВАК:

1. Ткачев П. В., Кривцов А. М. Использование потенциала Морзе для описания зависимости откольной прочности материалов от скорости деформирования / П. В. Ткачев, А. М. Кривцов // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. — 2012. — Т. 3, № 5. — С. 70–75.

2. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю., Ткачев П. В. Устойчивость идеальной бесконечной двумерной кристаллической решетки / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко, П. В. Ткачев // Доклады Академии Наук. — 2012. — Т. 442, № 6. — С. 755-758.
3. Индейцев Д. А., Кривцов А. М., Ткачев П. В. Исследование методом динамики частиц взаимосвязи между откольной прочностью и скоростью деформирования твердых тел / Д. А. Индейцев, А. М. Кривцов, П. В. Ткачев // Доклады Академии Наук. — 2006. — Т. 407, № 3. — С. 341-343.

б) Другие публикации:

1. Кривцов А. М., Волковец И. Б., Ткачев П. В., Цаплин В. А. Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твердых тел / А. М. Кривцов, И. Б. Волковец, П. В. Ткачев, В. А. Цаплин // Труды всероссийской конференции «Математика, Механика и Информатика», посвященной 10-летию РФФИ. — 2005. — М.: Физматлит. — С. 361-376.
2. Ткачев П. В. Компьютерное моделирование ударного разрушения / П. В. Ткачев // Тезисы докладов II Всероссийской конференции, посвященной памяти академика А. Ф. Сидорова, Абрау-Дюрсо. — 2004. — С. 100-101.
3. Tkachev P. V. Stability loss criterions of the material with microstructure / P. V. Tkachev // Proceedings of the XXXII Summer School «Advanced Problems in Mechanics», Saint-Petersburg. — 2004. — P. 423-424.
4. Tkachev P. V., Krivtsov A. M. Computer simulation of 2D dynamic fracture: anisotropic effects in spall crack formation / P. V. Tkachev, A. M. Krivtsov // Proceedings of the XXXI Summer School «Advanced Problems in Mechanics», Saint-Petersburg. — 2003. — P. 362-364.
5. Ткачев П. В., Кривцов А. М. Откольное разрушение при плоском ударном взаимодействии пластин / П. В. Ткачев, А. М. Кривцов // XXXI Неделя науки СПбГПУ, 25-30 ноября 2002. Материалы межвузовской научной конференции. — 2003. — С. 25-27.
6. Ткачев П. В., Кривцов А. М. Разрыв связей в плоской системе с парным потенциалом взаимодействия / П. В. Ткачев, А. М. Кривцов // XXXI Неделя науки СПбГПУ, 25-30 ноября 2002. Материалы межвузовской научной конференции. — 2003. — С. 27-28.
7. Ткачев П. В., Кривцов А. М. Учет эффекта Пуассона при плоском ударном взаимодействии пластин / П. В. Ткачев, А. М. Кривцов // XXXI Неделя науки СПбГПУ, 25-30 ноября 2002. Материалы межвузовской научной конференции. — 2003. — С. 29-31.
8. Ткачев П. В., Кривцов А. М. Определение пороговой скорости откольного разрушения при плоском ударном взаимодействии пластин / П. В. Ткачев, А. М. Кривцов // Тезисы докладов XIV Всероссийской конференции «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики», посвященной памяти К. И. Бабенко. Дюрсо, Новороссийск. — 2002. — С. 154-155.