

УДК 004.942

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ И СТРУКТУРЫ ЗАДАВАЕМОЙ РЕШЕТКИ НА РАСЧЕТЫ УПРУГИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛА

© Гацко А.А., Степанова Л.В.

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

error37lol@gmail.com, stepanova.lv@ssau.ru

Метод молекулярной динамики – один из высокоэффективных инструментов компьютерного моделирования в современной науке, позволяющий исследовать поведение молекул и атомов в различных условиях, тем самым заменяя проведение натуральных экспериментов [1–3]. В современной механике деформируемого твердого тела он позволяет проводить расчеты параметров механики разрушения, что делает его необходимым инструментом компьютерного моделирования, например для определений значений тензора упругих модулей. Так как метод классической молекулярной динамики дает возможность анализировать большеразмерные системы (системы, состоящие из большого числа атомов), то встает вопрос о задании этого числа для оптимального и точного расчета. Применение других моделей, в особенности поликристаллических, позволяет получить лучшие результаты и максимально приблизить их к реальным материалам.

Рассмотрим в настоящем исследовании использование метода молекулярной динамики при помощи вычислительного пакета LAMMPS. За основу взята гранецентрированная кристаллическая решетка меди. Использован один из наиболее распространенных потенциалов взаимодействия для металлов – потенциал-метод погруженного атома EAM [2]. В ходе расчета получаем данные о потенциальной энергии системы и деформации, задавая разные размеры кристаллической решетки. Аппроксимируя зависимость потенциальной энергии от деформации полиномиальной кривой, рассчитываем тензор упругих модулей. В свою очередь, получаем из него информацию о параметрах упругости материала [3]. Проводим расчеты для разных размеров блока задаваемой решетки, тем самым генерируя большее количество атомов. Ниже приведены результаты расчетов тензора упругости ГЦК меди для размеров кристаллической решетки 32*32*32 и 64*64*64 соответственно:

$$\begin{bmatrix} 163.6 & 122.1 & 122.1 & 0 & 0 & 0 \\ 122.1 & 163.6 & 122.1 & 0 & 0 & 0 \\ 122.1 & 122.1 & 163.6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 75.8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 75.8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 75.8 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 166.7 & 123 & 123 & 0 & 0 & 0 \\ 123 & 166.7 & 123 & 0 & 0 & 0 \\ 123 & 123 & 166.7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 76.9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 76.9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 76.9 \end{bmatrix}$$

Тензоры упругости ГЦК алюминия для размеров кристаллической решетки 32*32*32 и 64*64*64 соответственно:

$$\begin{bmatrix} 107.6 & 79.9 & 79.9 & 0 & 0 & 0 \\ 79.9 & 107.6 & 79.9 & 0 & 0 & 0 \\ 79.9 & 79.9 & 107.6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 45.6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 45.6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 45.6 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 108.1 & 81.3 & 81.3 & 0 & 0 & 0 \\ 81.3 & 108.1 & 81.3 & 0 & 0 & 0 \\ 81.3 & 81.3 & 108.1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 45.9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 45.9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 45.9 \end{bmatrix}$$

Результаты моделирования представлены на рис. 1 и 2. На рис. 1 показаны упругие свойства меди: модуль Юнга, модуль сдвига и коэффициент Пуассона.

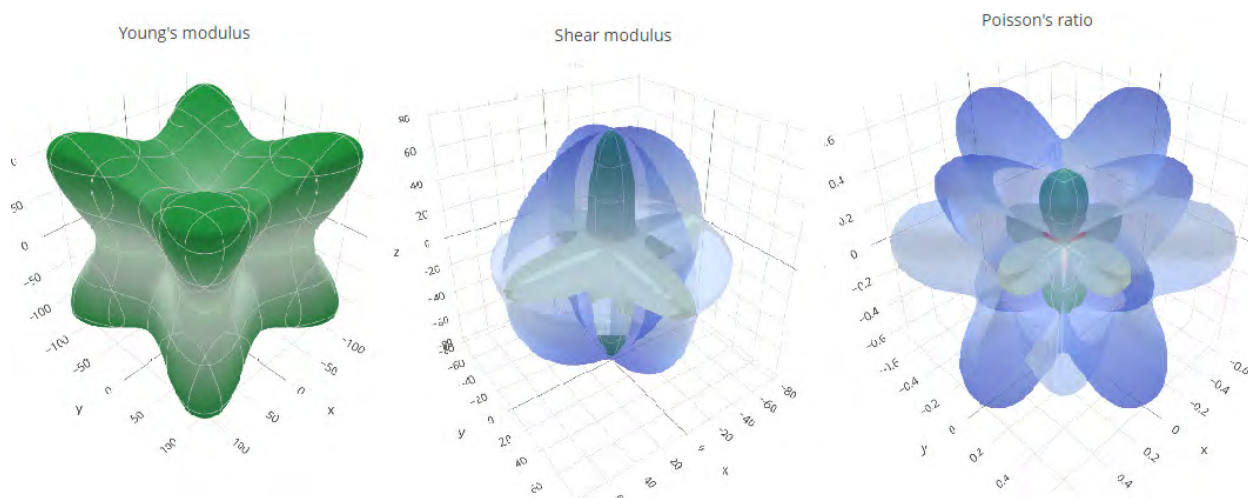


Рисунок 1 – Визуализация упругих свойств ГЦК меди

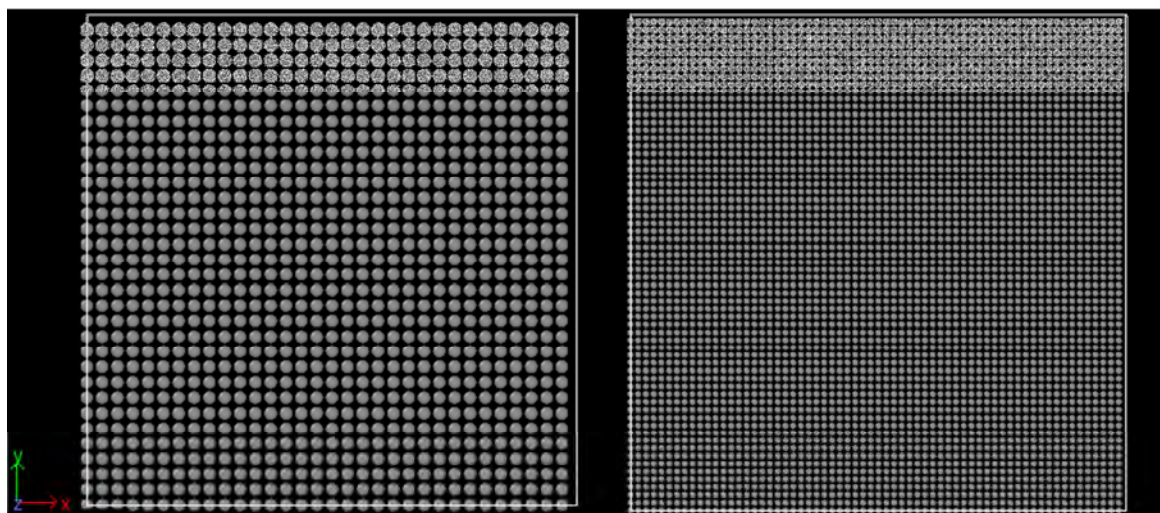


Рисунок 2 – Виды моделируемой области

В работе определены компоненты тензора упругих модулей для разных заданных размеров кристаллических решеток меди и алюминия. Полученные результаты демонстрируют повышение точности при выборе большего количества атомов для проведения расчетов в определении упругих свойств материала.

Библиографический список

1. Агафонов А.Н., Еремин А.В. Метод классической молекулярной динамики в моделировании физико-химических процессов: учеб. пособие. Самара: Изд-во Самарского университета, 2017. 68 с.
2. Моделирование в физике конденсированного состояния на основе применения программы LAMMPS: практикум / С.В. Дивинский, А.В. Покоев, Д.С. Синеглазов [и др.]. Самара: Издательство Самарского университета, 2020. 100 с.
3. Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. 2022. Vol. 119. P. 103298.