

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ НАНОРАЗМЕРНОГО СТЕРЖНЯ ПРИ ЦИКЛИЧЕСКОЙ НАГРУЗКЕ

И.Ф. Головнев, Е.И. Головнева, А.В. Уткин

*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН  
630090, Новосибирск, Россия*

**Введение.** Актуальность исследования усталостных повреждений и разрушений металлов, а также изучение влияния начальных и внешних условий на их свойства на наномасштабном уровне связана с важностью предупреждения различных техногенных катастроф, к которым приводит усталостное разрушение материалов. Необходимость таких исследований обусловлена отсутствием на данный момент времени необходимой экспериментальной базы для проведения динамических исследований накопления разрушений на наноуровне. Модели, основанные на континуальной теории, не дают и не могут дать информацию о физических процессах на атомарном уровне, происходящих при циклическом нагружении материала. Все вышеприведенные причины и обусловили необходимость применения метода молекулярной динамики, который, в силу своего пространственно-временного масштаба, дает уникальную возможность разработки физико-математической модели развития усталостных повреждений в твердых телах.

**Физическая модель.** Описание физической модели, внешнего растягивающего напряжения  $\sigma_0$ , численной схемы представлено в более ранней статье авторов [Golovnev I.F., Golovneva E.I., Merzhievsky L.A., Fomin V.M. Defect generation as a phenomenon of structure self-organization under external loads // Phys. Mesomech. 2013. Vol. 16, No. 4. P. 294-302].

Граничные условия моделировались следующим образом. Атомы левой крайней плоскости, перпендикулярной оси X, помещались в неподвижный зажим. При этом, атомы неподвижной грани помещались в поле

$$U_2 = \frac{k}{4} \cdot (x_i - x_i^0)^4 + \frac{k}{4} \cdot (y_i - y_i^0)^4 + \frac{k}{4} \cdot (z_i - z_i^0)^4$$

где  $x_i^0, y_i^0, z_i^0$  – координаты атомов неподвижной грани в начальный момент времени.

Такое задание начальных и граничных условий позволило в настоящей работе провести сравнительный численный анализ процессов в наноструктуре для следующих типов внешней нагрузки: постоянное растягивающее внешнее напряжение; постоянное сжимающее внешнее напряжение; квазистатическое нарастание нагрузки; гармоническое внешнее напряжение.

**Результаты.** На первом этапе проведем анализ процессов в структуре под действием **постоянного растягивающего** напряжения, приложенного к наностержню в момент  $t = 0$ . Зависимость нарастания нагрузки при этом описывается функцией Хэвисайда. Разрушение кристалла происходит при нагрузке 5 ГПа (см. рис. 1).

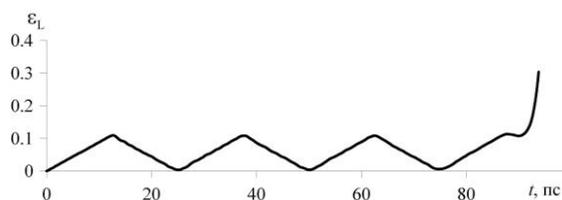


Рис.1 Зависимость относительного удлинения стержня от времени.  
Внешнее растягивающее напряжение 5 ГПа.

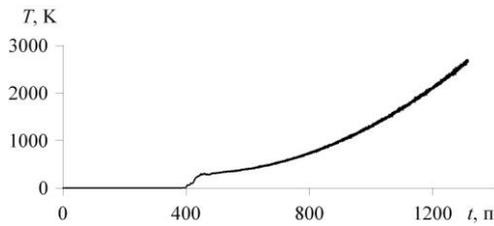


Рис.2 Зависимость температуры стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа

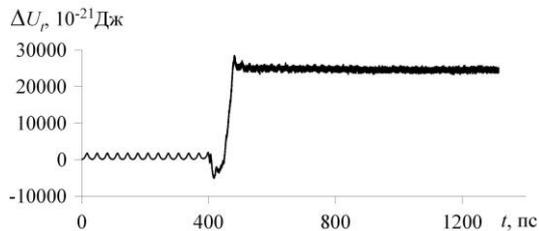


Рис.3 Зависимость изменения потенциальной энергии взаимодействия атомов стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа

Проанализируем действие **постоянного сжимающего** напряжения 1 ГПа. Зависимость нарастания нагрузки при этом так же описывается функцией Хэвисайда. Процесс разрушения был вызван потерей устойчивости стержня. Смещение атомных плоскостей вызвало сильное поглощение энергии и накопление ее в виде тепловой составляющей (рис.2).

На рис. 4 представлена зависимость относительного удлинения стержня от времени при внешнем **сжимающем квазистатическом напряжении**. Видно, что увеличение времени нарастания сжимающего напряжения приводит к небольшому увеличению времени до разрушения, и снижению амплитуды колебаний примерно в 10 раз. При этом период колебаний меняется очень слабо (в пределах 10% относительно случая постоянного сжимающего напряжения).

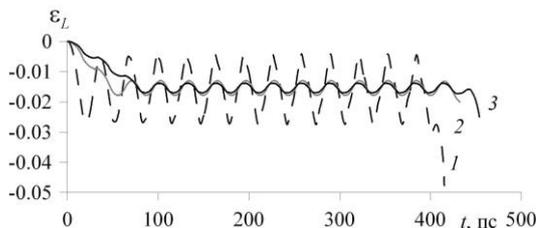


Рис. 4 Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа. Интервалы нарастания напряжения: 1 – 10 пс, 2 – 50 пс, 3 – 80 пс.

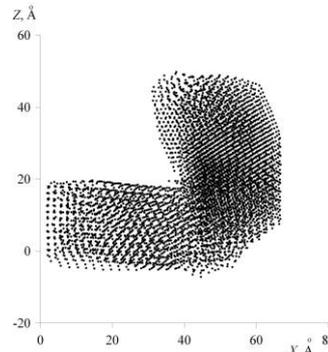


Рис. 5 Расположение атомов структуры в момент 500 пс. Внешнее сжимающее напряжение 1.0 ГПа, период нарастания напряжения 80 пс. Расположение атомов структуры в момент 500 пс.

Наибольший интерес в теории усталостного разрушения представляет внешнее напряжение, зависящее от времени по гармоническому закону. Был исследован случай воздействия на наноструктуру внешним напряжением, изменяющимся со временем по синусоидальному закону:  $\sigma = \sigma_0 \sin(\omega t)$  с амплитудой  $\sigma_0 = 1$  ГПа (см. рис.6–7)

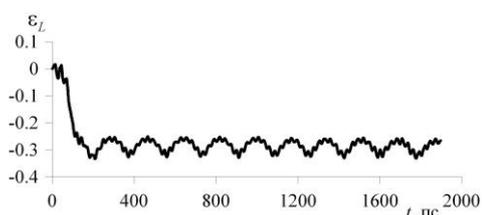


Рис. 6 Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Амплитуда внешнего напряжения 1 ГПа.

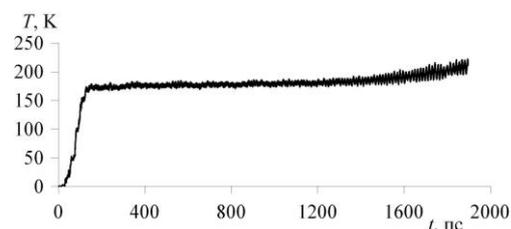


Рис. 7 Зависимость температуры стержня от времени. Амплитуда внешнего напряжения 1 ГПа.

### Заключение.

1. Форма импульса при включении внешнего напряжения на подвижном зажиме наностержня, оказывает сильное влияние на дальнейшую эволюцию системы:

– растягивающее напряжение, описываемое функцией Хэвисайда, вызывает осцилляции относительного удлинения с амплитудой на порядок большей, чем в случае квазистатического роста нагрузки;

– сжимающее напряжение, описываемое функцией Хэвисайда, вызывает более быстрое разрушение структуры по сравнению со случаем квазистатического включения;

2. Разрушение наноструктуры с идеальной кристаллической решеткой под воздействием внешнего сжимающего напряжения обусловлено потерей устойчивости. Критическое значение внешнего напряжения, при котором наступает разрушение, в этом случае значительно ниже, чем в случае растягивающего напряжения.

Для случая внешнего напряжения, зависящего от времени по гармоническому закону:

3. Разрушение не наблюдалось для тех же значений амплитуды, для которых в случае сжимающего напряжения наноструктура разрушалась.

4. В наноструктуре с идеальной кристаллической решеткой, формировались дефекты по типу потери устойчивости в атомных плоскостях.

5. Момент начала формирования дефектов в наноструктуре совпадает с началом поглощения внешней энергии и сильным ростом температуры.

6. Рассчитанный спектр поглощения энергии позволил выявить в исследуемом интервале частот резонансное поглощение на частотах, близких к собственным частотам колебаний, обусловленных постоянным приложенным напряжением.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-01-00068 «Исследование влияния температуры на развитие усталостного разрушения металлических наноструктур» и в рамках Программы фундаментальных исследований «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций».