

0.1. Ермилов Е.П. Поиск временного интервала при сравнении континуального и атомистического подходов для кристалла никеля с гранецентрированной кубической решёткой в ПО LAMMPS

В данной работе рассматривается соответствие (по времени) методов расчёта напряжений близ центральной трещины континуальным и атомистическим подходами в механике деформируемого твёрдого тела для кристалла никеля. Континуальный подход реализуется через решение системы уравнений состояния при одноосном растяжении по функции Эри, при этом атомистический подход в ПО LAMMPS использует различные потенциалы (для данной работы используется потенциал "погруженного атома" предложенными Доу и Баскесом [1]).

Актуальность данной работы заключается в отсутствии широкого распространения смещения континуального и атомистического подхода в программных реализациях.

Для ограничения временного отрезка и подбора скорости деформации произведено моделирование в LAMMPS одноосного растяжения без трещины кристалла никеля с гранецентрированной кубической решёткой (ГЦК). Был выбран NPT ансамбль, температура равновесия 300 К. Кристалл представляет собой куб с линейным размером 1 нм. Загружен потенциал внедрённого атома.

После построения графиков "напряжение-деформация" была выбрана скорость деформации и ограничено время моделирования для будущей трещины до 10 пс.

Для решения задачи о сравнении континуальной механики деформируемого твёрдого тела с атомистическим подходом запишем уравнения состояния у края острой трещины (в силу одноосного растяжения, данная система инвариантна для двух краёв) для компонентов тензора напряжений и функции напряжений Эри χ :

$$\begin{cases} \sigma_\theta = \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2}, \\ \sigma_r = \nabla^2 \chi - \sigma_\theta, \\ \tau_{r\theta} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \right). \end{cases}$$

Решением данной системы уравнений является компоненты тензора напряжений, одним из множителей которого являются универсальные угловые распределения [2]. Компоненты тензора были реализованы в данной работе в виде функции для языка программирования Python.

Далее была создана инструкция в ПО LAMMPS для моделирования пластины из никеля, содержащая 200000 атомов с линейными размерами (35.063, 35.063, 1.052) нм. К пластине применялась растягивающая нагрузка вдоль оси y . Далее в OVITO была произведена обработка выходного файла. Создаём кольцевую структуру для построения графика зависимости элемента тензора напряжений от полярного угла в окрестности вершины

трещины для временных шагов 2.5, 5, 7.5, 10 пс.

После построения графиков наблюдается соответствие континуального и атомистического подхода для никеля с ГЦК-структурой на временных шагах 2.5, 5 пс.

Научный руководитель — д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой математического моделирования в механике Самарского университета Степанова Л. В.

Список литературы

- [1] Daw S., Baskes M. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Physical Review B. 1984. Vol. 29. N. 12. P. 6443–6453.
- [2] Степанова Л. В. Экспериментальное и конечно-элементное определение коэффициентов многопараметрического асимптотического разложения М. Уильямса у вершины трещины в линейно-упругом изотропном материале. Часть I // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2020. № 4. С. 237–249.