

МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ И РАЗРУШЕНИЯ МЕТАЛЛОВ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

Г.Э. Норман, А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва
Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Моск. обл.*

Аннотация

Работа посвящена многомасштабному моделированию, основанному на методе молекулярной динамики, процессов пластического деформирования и разрушения конденсированных сред при высокоскоростном деформировании в условиях ударных волн и волн разгрузки. Предпринята попытка построения теории наблюдаемых явлений, начиная с атомного уровня. Основными особенностями теории являются многомасштабный подход, анализ термодинамических путей процессов релаксации на фазовой диаграмме, явное использование стохастических свойств метода молекулярной динамики. Рассмотрено несколько «элементарных процессов» (формирование и рост полостей под действием растягивающих напряжений, зарождение и движение дислокаций), имеющих место в моно- и нанокристаллических материалах. Представлен пример многомасштабной модели откольных явлений, демонстрирующий возможности выхода за пространственные и временные масштабы прямого атомистического моделирования. Для описания межатомных взаимодействий в металлах (Al, Cu, Fe) используется метод погруженного атома. Приводится сопоставление с доступными экспериментальными данными. Обсуждается иерархия динамических и стохастических процессов.

MULTISCALE MODELLING OF PLASTICITY AND FRACTURE OF METALS UNDER HIGH STRAIN RATE

We consider modeling and simulation of dynamic atomistic phenomena and processes in condensed matter under high strain rate: intensive shock compression and release, uniaxial and hydrostatic stretching. An attempt is done to draft out the atomistic theory of the phenomena. The basic concepts for the theory are the multiscale approach, the analysis of thermodynamic paths of relaxation on phase diagrams, the explicit utilization of the stochastic features of the MD method. A number of "elementary processes" (cavitation of voids at negative pressures, voids growth, dislocation formation and motion, phase transformations, etc.) are briefly considered for both single and nanocrystals. A theoretical MD based multiscale approach is presented for the spall process which could be used to extend the MD results to the larger spatial and temporal scales. Examples are presented for Al, Cu and Fe. The EAM potentials are deployed. Comparisons with the experimental data available are given. A hierarchy of dynamic and stochastic processes is discussed.

1. ВВЕДЕНИЕ

Основными концепциями, развиваемые в данной работе, являются (i) многомасштабные подходы, (ii) анализ термодинамических путей релаксации на фазовой диаграмме, (iii) использование стохастических свойств метода молекулярной динамики (МД).

Многомасштабный подход состоит из трех основных частей: проведение прямых молекулярно-динамических расчетов исследуемого явления, расщепление явления на элементарные процессы и определение их механизмов и кинетических закономерностей [1–3], объединение элементарных процессов с помощью кинетических уравнений в атомистическую модель. Такой подход позволяет выйти за рамки пространственных и временных масштабов, доступных прямому молекулярно-динамическому расчету.

Анализ термодинамических путей релаксации на фазовой диаграмме включает следующие составляющие. Проводится термодинамический путь процесса релаксации на фазовой диаграмме исследуемого материала. Анализируется положение пути релаксации по отношению к линии плавления, границам устойчивости жидкого и кристаллического состояний. Механизмы распада определяются их относительным расположением на фазовой диаграмме.

Основная идея МД заключалась в решении задачи Коши для систем, описываемых классическими урав-

нения движения. Однако, в результате Ляпуновской неустойчивости траектории, которые в начальный момент были близки друг к другу, экспоненциально расходятся со временем. Типичное время, на котором система забывает свое начальное состояние, называется временем динамической памяти t_m . Стохастичность траекторий появляется при временах расчета, больших t_m . Характерное значение t_m для конденсированных сред порядка 10 пс. Длительность МД расчетов на несколько порядков больше. Таким образом, МД равновесных систем является методом, который сохраняет ньютоновскую динамику только на временах меньше t_m , при расчете же на больших временах происходит статистическое усреднение по начальным состояниям вдоль МД траектории [4]. По этой причине МД моделирование релаксации требует стандартов, которые включают использование стохастических особенностей МД [5].

Из представленных выше трех основных концепций главной темой данного сообщения является многоуровневый подход. Две другие ключевые идеи: изучение термодинамических путей релаксационных процессов и использование стохастических особенностей метода МД, являются скорее эффективными вспомогательными средствами расчета требуемых характеристик и подробнее проиллюстрированы в [1–3]. Большинство расчетов проведено с помощью молекулярно-динамической программы LAMMPS [6].

2. ПРЯМОЙ МД РАСЧЕТ

Явление откола можно наблюдать при суперпозиции волн разрежения, возникших в результате отражения от свободных поверхностей ударника и мишени. В представленном МД расчете ударная волна в нанокристаллической меди возникает при налетании ударника на мишень со скоростью 1 км/с. Толщина ударника составляет половину от толщины мишени. Исходная температура $T=300$ К. На рис. 1 представлены 5 моментов времени после отражения ударной волны от свободной поверхности мишени: (а) – 30 пс, (б) – 37.5 пс, (в) – 45 пс, (г) – 52.5 пс, (д) – 60 пс. Общее число атомов составляет 17 миллионов, периодические граничные условия используются вдоль направлений x, y . Распределение продольной составляющей напряжений p_{zz} и температуры T вдоль оси z также представлены на рисунке. Температура в каждом срезе вдоль МД ячейки рассчитывалась как средняя кинетическая энергия хаотического движения атомов.

Картина среза системы на рис. 1а показывает начало отражения волны сжатия от свободной поверхности мишени: плавное изменение напряжений с правой стороны означает распространение волны разрежения по ударно сжатому веществу (пик давления). Похожая отраженная волна распространяется с левой стороны. При этом температура вдоль системы изменяется слабо. Суперпозиция двух волн приводит к возникновению импульса растяжения (рис. 1б). Откольная прочность может быть получена из расчета максимально достижимого напряжения в области растяжения.

Образование полостей приводит к резкому возрастанию кинетической энергии атомов вокруг них (рис. 1в,г). В результате сжатия вещества вокруг несплошностей происходит также увеличение давления, которое приводит к формированию откольного импульса. Процессы роста и объединения полостей приводят к формированию откольной плоскости (рис. 1д).

3. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ПРОЦЕССЫ

В данной части будут рассмотрены шесть элементарных процессов, а также два методологических вопроса: стандарты МД моделирования и термодинамические пути релаксации. Для того, чтобы определить скорость спонтанного зарождения полостей в области отрицательных давлений используется метод, который был развит для определения скорости нуклеации [7]. В качестве примера рассмотрим нуклеацию полостей в монокристалле алюминия при фиксированной степени растяжения для некоторого МД расчета (рис. 2а). Число атомов составляет $N=32000$, периодические граничные условия используются вдоль всех трех направлений. Таким образом, из единичного МД расчета получается, во-первых, время жизни τ_i вдоль данной МД траектории, а также значение давления, которое соответствует данной степени растяжения. Время жизни вдоль МД траектории, является случайной величиной, только в том случае, когда его значение превышает время динамической памяти t_m . Более того, необходимо провести несколько независимых расчетов для фиксированной степени растяжения, чтобы получить распределение времен жизни [5,7]. Результаты расчета времен жизни собраны на рис. 2б. Здесь $n(t)$ означает число МД траекторий, со временем жизни

большим, чем t . Аппроксимация прямой линией в полулогарифмическом масштабе говорит о пуассоновском характере распада метастабильного состояния. Зная среднее время жизни $\tau = \langle \tau_i \rangle$ можно определить скорость нуклеации по формуле $J = 1/(N\tau)$.

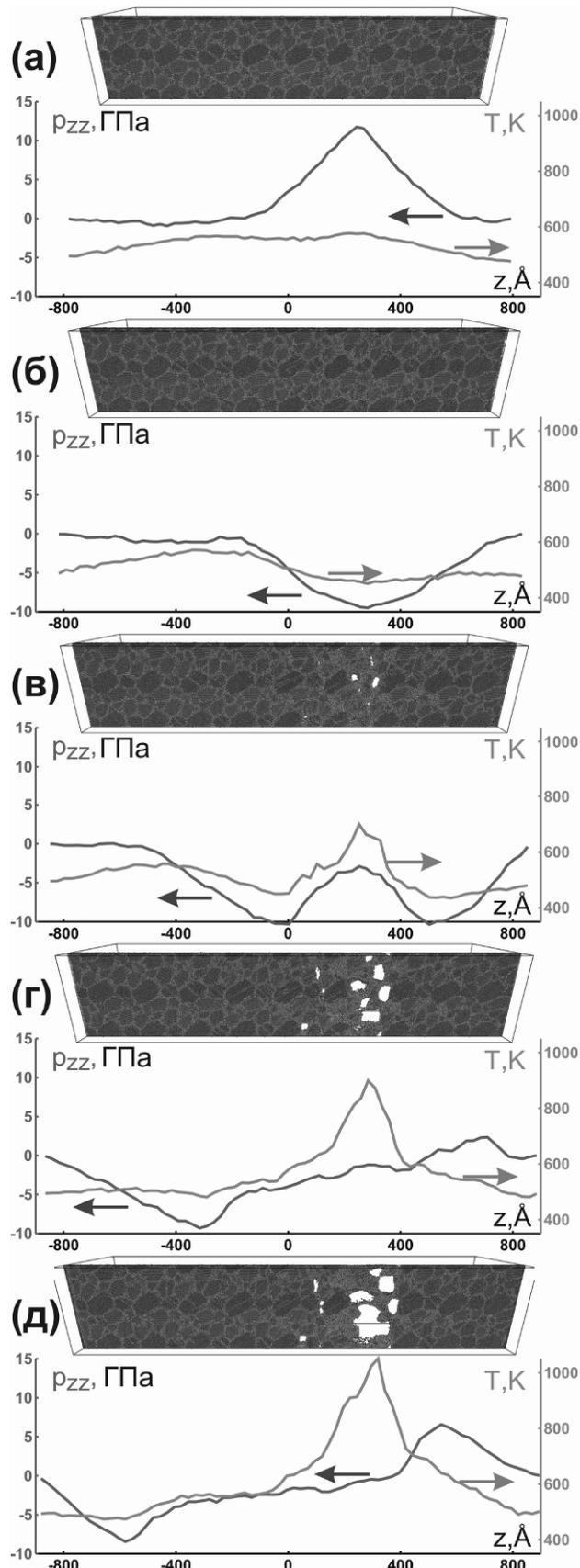


Рис. 1. Отражение ударной волны от поверхности мишени и откол в нанокристаллической меди

Рис. 2. иллюстрирует некоторые особенности стандарта моделирования релаксации. В частности, моделирование релаксации должно начинаться из (мета)стабильного начального состояния: мгновенное значение давления флуктуирует вокруг некоторого среднего значения, соответствующего уравнению состояния. Более того, для получения более полной картины релаксационного процесса необходимо использовать целый набор начальных состояний, различающихся микроскопически, но отвечающих одному макросостоянию. Рассматривается целый пучок траекторий, а не единичное решение задачи Коши. Такой набор траекторий может быть получен даже из одного и того же начального состояния, но с использованием различных шагов интегрирования. При этом необходимо контролировать независимость или зависимость результатов от ансамбля. Использование пространственно- и время- разрешенной диагностики позволяет эффективно рассмотреть развитие процесса релаксации. Для уточнения см. [5]. Помимо использования вычислительной физики при выборе схемы интегрирования, реализации алгоритмов диагностики и усреднения, моделирование требует привлечения теоретической физики: выбор подходящих граничных условий и общего числа атомов N , оценку влияния квантовых явлений и т.д.

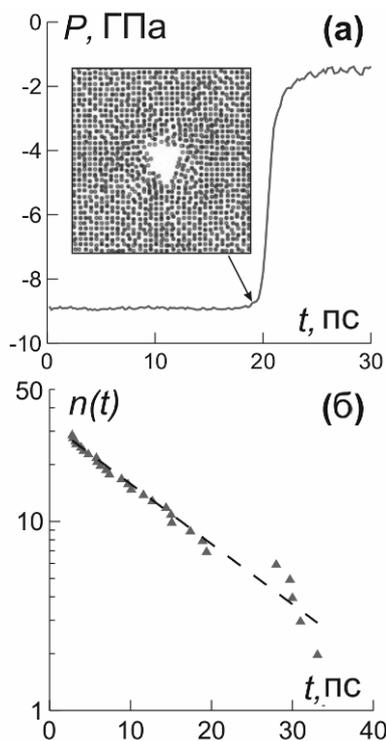


Рис. 2. Гомогенная нуклеация: типичный МД расчет (а) и расчет частоты нуклеации из серии расчетов (б)

Для иллюстрации термодинамических путей релаксации на фазовой диаграмме на рис. 3 представлена $P - T$ диаграмма монокристаллического алюминия, где возможны два сценария гидростатического растяжения алюминия. В области высоких температур разрушение происходит в два последовательных этапа: на первом происходит локальное плавление кристаллической решетки, а затем зарождение полостей в образовавшемся расплаве. Метастабильная жидкость образуется в результате процесса растяжения, при переходе

линии плавления, как это показано на рис. 3а, вследствие флуктуаций параметра порядка. Другой механизм разрушения наблюдается в области низких температур, когда граница устойчивости обусловлена развитием больших флуктуаций плотности и полость зарождается непосредственно в кристаллической фазе (рис. 3б). Локальное плавление ведет к уменьшению температуры и незначительному изменению давления, тогда как образование полостей характеризуется резким нагревом (сравни термодинамические пути в случаях а и б после достижения кинетической границы устойчивости кристалла).

Два варианта механизма разрушения определяются относительным расположением кривой плавления, спинодалями жидкости и кристалла. $P - T$ диаграммы могут довольно сильно отличаться для различных веществ. Спинодаль жидкости пересекает и, более того, ограничивает кривую плавления Леннарда-Джонсовской системы [8,9]. Для свинца спинодаль жидкости и кривая плавления располагаются довольно далеко друг относительно друга. Механизм разрушения также отличается.

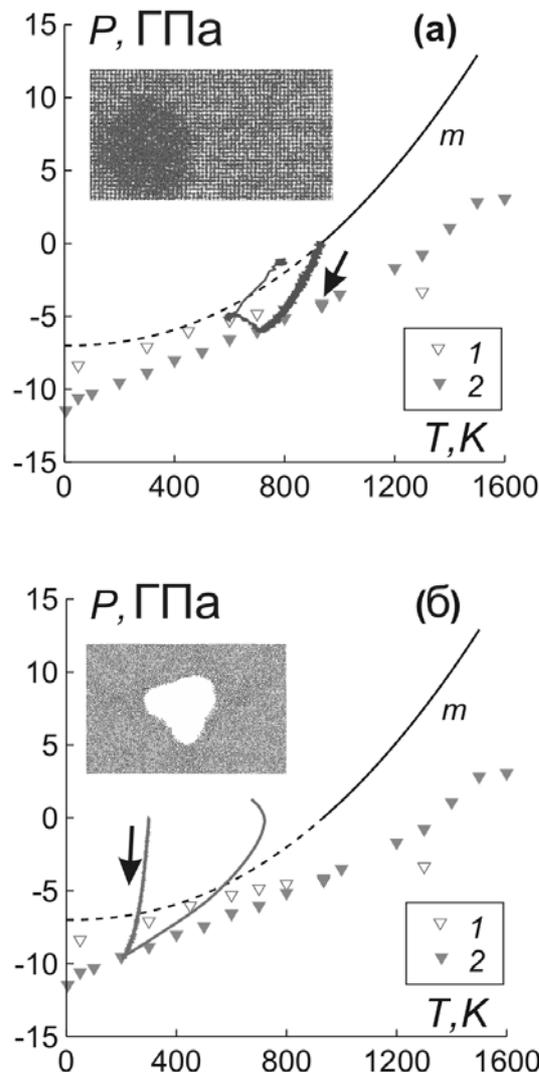


Рис. 3. Два сценария гидростатического растяжения монокристалла алюминия: двух этапный (а) и одно этапный механизмы разрушения. m – кривая плавления алюминия, согласно уравнению Симона. Кинетические границы стабильности, полученные с помощью МД: 1 – жидкость, 2 – кристалл

Когда время жизни метастабильного состояния велико, прямое МД моделирование процессов разрушения затруднительно, поскольку время ожидания жизнеспособного зародыша конкурирующей фазы оказывается большим. До некоторого предела время жизни метастабильного вещества можно уменьшать, просто увеличивая размер системы, что означает рост вероятности появления критической флуктуации.

Скорость разрушения метастабильной фазы можно посчитать, вводя нужный зародыш искусственно, например, вырезая полость небольших размеров в растянутой системе. Под действием растягивающих напряжений полость начинает расти, и, исходя из МД-расчета, можно определить скорость этого роста [2].

Спонтанное гетерогенное зарождение полостей при разрушении проиллюстрируем на примере одноосного растяжения нанокристаллической меди. На рис. 4 представлены последовательные состояния системы.

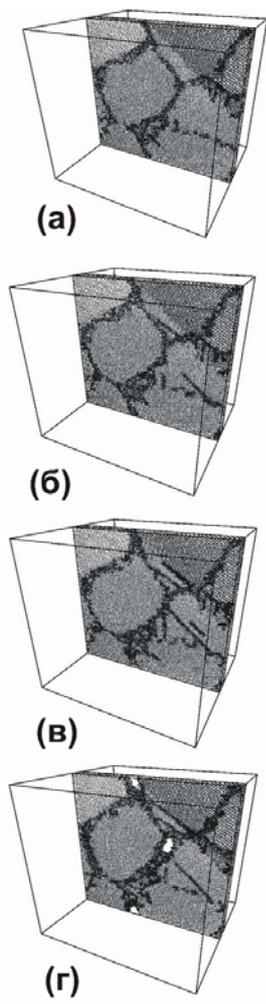


Рис. 4. Образование полостей при одноосном растяжении нанокристаллической меди со скоростью $\dot{V}/V_0 = 3 \times 10^9 \text{ c}^{-1}$, средний размер зерна $d = 9 \text{ нм}$. Степень деформации: (а) – $V/V_0 = 1.077$, (б) – $V/V_0 = 1.085$, (в) – $V/V_0 = 1.093$, (г) – $V/V_0 = 1.112$

Полости образуются в одних и тех же местах вне зависимости от скорости деформирования. Положение этих «слабых» мест определяется локальной концентрацией напряжений. Получена зависимость предельно достижимого напряжения от скорости деформирования. Результаты МД хорошо согласуются с экспериментальными данными [1].

Пластическая деформация посредством зарождения и движения дислокаций предшествует разрушению. Последовательные состояния процесса роста дислокационной петли представлены на рис. 5. Скорость движения частичных дислокаций может быть получена непосредственно из расчета.

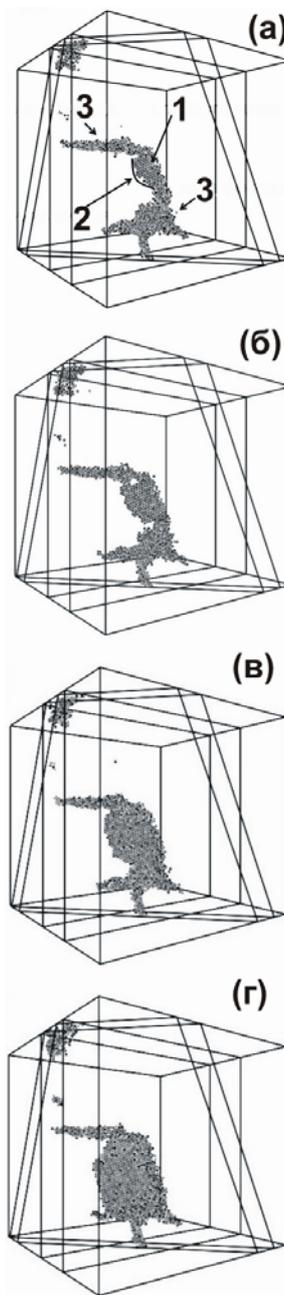


Рис. 5. Образование сдвиговых плоскостей (1) в результате движения частичной дислокации (2). Ближайшие границы зерен (3). Плоскость сдвига выделена с помощью срезов и параметра центральной симметрии ($0.04 < C < 0.5$). $\dot{V}/V_0 = 10^9 \text{ c}^{-1}$, средний размер зерна $d = 9 \text{ нм}$. Представлены три момента времени: (а) – 63 пс, (б) – 66 пс, (в) – 70 пс, (г) – 76 пс

Для моделирования сплавов необходимо учитывать влияние на прочностные свойства основного кристалла атомов примеси, распределенных в объеме матрицы равномерно, либо в виде наноразмерных включений. Примером служит значительное снижение прочности меди с алюминиевыми включениями [3].

Рассмотрены два различных примера фазовых превращений при деформировании. Превращение ОЦК структуры железа в плотноупакованную структуру в волне сжатия [10] и переход в ГЦК структуру в области разгрузки [11].

3. МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Включение рассчитанных с помощью МД данных о значении частоты нуклеации и скорости роста полости в кинетическую теорию зарождения и роста (NAG, nucleation and growth) позволяет перейти от моделирования развития отдельных пор в молекулярной динамике к кинетике разрушения на мезоскопическом уровне и предсказывать величину откольной прочности P_{sp} [2]. Сравнение результатов, полученных из кинетической теории «МД + NAG» с данными эксперимента [12] и прямого МД расчета представлено на рис. 6а в диапазоне скоростей деформирования $\dot{V}/V_0 = 10^6 \div 10^{10} \text{ с}^{-1}$. Как в прямом МД расчете, так и в расчетах для модели NAG использовалось число частиц порядка 10^5 . Представленные данные находятся в различных диапазонах, однако, аппроксимируются единой гладкой кривой.

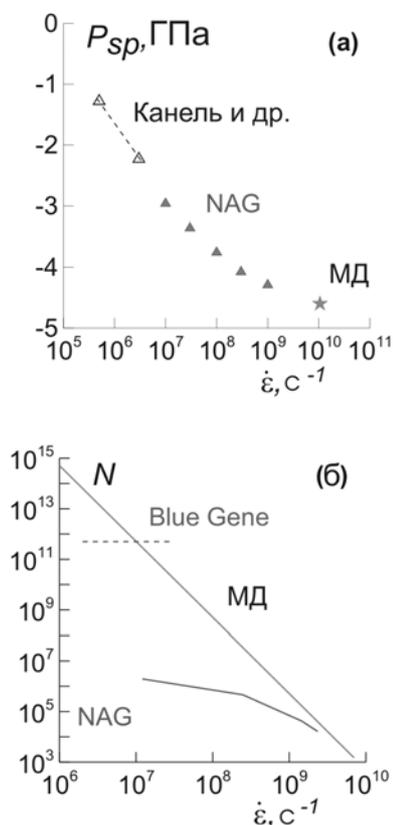


Рис. 6. Многомасштабный подход: (а) сравнение экспериментальных данных [12] с результатами модели NAG и прямого МД расчета алюминия по откольной прочности при $T = 900 \text{ К}$. Зависимость необходимого числа атомов для прямого МД расчета и с использованием схемы «NAG+МД». Пунктирной кривой показано предельное значение числа частиц, достижимое на суперкомпьютере Blue Gene

Среднее расстояние между полостями обратно пропорционально скорости деформирования (подробности можно найти в [2,14]). Следовательно, объем расчетной ячейки, необходимый для воспроизведения одновременно процессов зарождения и роста, обратно пропорционален третьей степени скорости деформи-

рования. Сплошная кривая на рис. 6,б представляет зависимость числа атомов в расчетной ячейке, необходимых для моделирования прямым методом МД или «МД + NAG», от скорости деформирования. Использование многомасштабного кинетического моделирования приводит к выигрышу на пять порядков в числе атомов по сравнению с прямым методом МД при скорости деформирования порядка 10^7 с^{-1} . Выигрыш достигается за счет раздельного рассмотрения зарождения и кинетики роста, используемого в подходе с кинетическим моделированием «МД + NAG».

4. ИЕРАРХИЯ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Явление откола является примером явления, позволяющим уменьшить необходимое число частиц в расчете за счет применения многомасштабного подхода. Необходимым условием использования многомасштабного подхода является в этом случае приближенная независимость друг от друга процессов формирования полостей при их множественном зарождении.

Однако есть другая категория процессов, требующих полного рассмотрения с помощью прямого моделирования. Такая потребность объясняется наличием временных и пространственных корреляций, которые не могут быть приведены в меньшие масштабы. Для каждой большой системы, таким образом, можно выстроить свою иерархию длин и времен корреляции. Увеличение числа частиц, используемых в прямом МД моделировании, позволяет, таким образом: а) увеличить размер корреляций, воспроизводимых в МД модели; б) тем самым учесть в расчете явления и процессы, появляющиеся на новом уровне; в) проверить многомасштабный подход. Аналогичным образом можно выстроить иерархию континуальных теоретических подходов, принимающих во внимание те или иные масштабы корреляций.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлено первое приближение к созданию теории ударно-волнового нагружения, разгрузки и разрушения металлов на атомистическом уровне. Развиваемый метод состоит в расщеплении сложной картины явления на элементарные процессы, анализе термодинамических путей релаксации, использовании стохастических свойств метода молекулярной динамики для расчета кинетических характеристик, сборке элементарных процессов в единую теорию. Представлены результаты моделирования нескольких элементарных процессов: спонтанное гомогенное и гетерогенное зарождение полостей, их рост, появление и движение частичных дислокаций в нанокристаллах, взаимодействие преципитатов нанометровых размеров с дислокациями. Обсуждается пример многомасштабной теории откольных явлений на примере монокристаллического алюминия.

Расчеты выполнены на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ), на кластере МСЦ РАН.

Авторы выражают признательность В.Е. Фортову и Г.И. Канелю за полезные обсуждения и интерес к данной работе. Работа выполнена при финансовой поддержке по программам фундаментальных исследо-

ваний РАН №3 и №9, Межсекционная программа ОЭММПУ РАН, гранту РФФИ №05-08-65423, а также в рамках проектов Министерства образования и науки РФ РНП2.1.712 и 2007-3-1.3-25-01-397 и контракта с Национальными лабораториями Сандия по программе US DOE/NNSA ASC.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

МД – молекулярная динамика

NAG – модель нуклеации и роста (nucleation and growth)

ЕАМ – метод погруженного атома (embedded atom method)

C_i – параметр центральной симметрии

V/V_0 – степень деформации

p_{xx} , p_{yy} , p_{zz} – нормальные составляющие тензора напряжений, ГПа

T – температура, К

N – число атомов

d – средний размер зерна, нм

t_m – время динамической памяти, пс

t_i – время жизни для i -го расчета, пс

\dot{V}/V_0 – скорость деформирования, s^{-1}

Индексы:

i – порядковый номер расчета

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yanilkin, A.V. et al. Atomistic simulation of high strain rate plasticity, spall damage and fracture of nanocrystalline Cu // In Shock Compression of Condensed Matter – 2007, Ed. by M.D. Furnish et al. American Institute of Physics, New York. 2007.
2. Kuksin, A.Y. et al. Modeling of Al crystal fracture under high-rate strain based on atomistic simulations // In Shock Compression of Condensed Matter – 2007, Ed. by M.D. Furnish et al. American Institute of Physics, New York. 2007.
3. Stegailov, V.V. et al. Atomistic study of nanoprecipitates influence on plasticity and fracture of crystalline metals // In Shock Compression of Condensed Matter – 2007, Ed. by M.D. Furnish et al. American Institute of Physics, New York. 2007.
4. Norman G.E., Stegailov V.V. // Comput. Phys. Comm. V. 147. 2002. P. 678.
5. Kuksin A.Y., Morozov I.V., Norman G.E., Stegailov V.V., Valuev I.A. // Mol. Simul. V. 31. 2005. P. 1005.
6. Plimpton S.J. // J. Comp. Phys. V. 117. 1995. P. 1–19. <http://lammps.sandia.gov/index.html>
7. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // ДАН. Т. 386. № 3. 2002. С. 328.
8. Kuksin A.Yu., Norman G.E., Stegailov V.V. // In: Computational Physics. Proc. of the 1st joint conference of ICCP6 and CCP2003. Ed. X.-G. Zhao, S. Jiang and X.-J. Yu. Rinton Press. 2005. P. 126.
9. Baidakov V.G., Protsenko S.P. // Phys. Rev. Lett. V. 95. 2005. P. 015701.
10. Стегайлов В.В., Янилкин А.В. // ЖЭТФ. Т. 131. № 6. 2007. С. 1064–1072.
11. Норман Г.Э., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. // ТВТ. Т. 45. № 2. 2007. С. 193–202.
12. Kanel G.I., Razorenov S.V., Fortov V.E. // J. Phys.: Condensed Matter. V. 16. 2004. P. S1007.
13. Barbee T.W., Seaman L., Crewdson R., Curran D.R. // J. of Materials. V. 7 1972. P. 393.
14. Belak J. // J. Comp.-Aided Mater. Design. V. 5. 1998. P. 193.