

УДК 539.3, 539.4

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРАТЕРООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ С ПОДЛОЖКОЙ

© 2023 г. А. В. Уткин^{1,*}, академик РАН В. М. Фомин^{1,2}

Поступило 26.06.2023 г.

После доработки 26.06.2023 г.

Принято к публикации 04.08.2023 г.

В представленной работе в рамках метода молекулярной динамики были проведены численные эксперименты по исследованию ударного взаимодействия металлических нанокластеров различного размера с металлической подложкой в широком диапазоне скоростей. Анализ полученных данных показал, что объем кратера остается пропорциональным энергии ударника и обратно пропорциональным динамической прочности материала, причем угловой коэффициент прямой не зависит от размера кластера и материала кластер-подложка.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, ударное взаимодействие, наноструктура, нанокластер

DOI: 10.31857/S2686740023060135, EDN: XPBKBS

Поведение материала под действием удара нанообъектов сложным образом зависит от физических свойств преграды и ударника. Описание явлений в материале при высокоскоростном ударном воздействии требует понимания физической картины упругопластических деформаций и разрушения. В силу сложности исследуемых явлений, разработка аналитических моделей процесса соударения деформируемых тел, учитывающих все характеристики разрушения, превращается в чрезвычайно сложную задачу.

Одним из возможных подходов является анализ явления методами теории подобия и размерности с последующими уточнениями на основе новых экспериментальных данных или результатов численного моделирования. В результате такого анализа можно выделить безразмерные независимые комплексы величин, связывающие основные характеристики материалов и параметры ударного воздействия с размером образовавшегося кратера [1–5].

Существует значительное количество исследований, где при помощи метода молекулярной динамики [6, 7] моделируются процессы высоко-

скоростного столкновения нанообъектов с преградой [8–10]. Как правило, в рамках такого подхода основное внимание уделяется физико-химическим явлениям, происходящим в ударнике и в преграде на микроуровне, исследуются зарождение и распространение различных дефектов в результате удара. При этом практически отсутствуют попытки обобщения полученных результатов с целью создания единой функциональной зависимости, связывающей безразмерные параметры ударника и преграды. Представленная работа посвящена построению такой функциональной зависимости на основе результатов численного моделирования в рамках метода молекулярной динамики.

ФИЗИЧЕСКАЯ СИСТЕМА И МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В численном эксперименте металлические сферические нанокластеры под углом 90 градусов ударялись о металлическую подложку со скоростями от 0.8 до 15 км/с, а материал кластера и пластины совпадал. В качестве рабочего материала была выбрана медь (кристаллическая решетка ГЦК) и титан (кристаллическая решетка ГПУ). Металлические нанокластеры вырезались из идеального образца материала кубической формы, и их размер менялся в широком диапазоне значений: диаметр медного нанокластера изменялся от 3.9 до 10 нм, диаметр титанового нанокластера изменялся от 5.8 до 11.8 нм.

¹Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

*E-mail: utkin@itam.nsc.ru

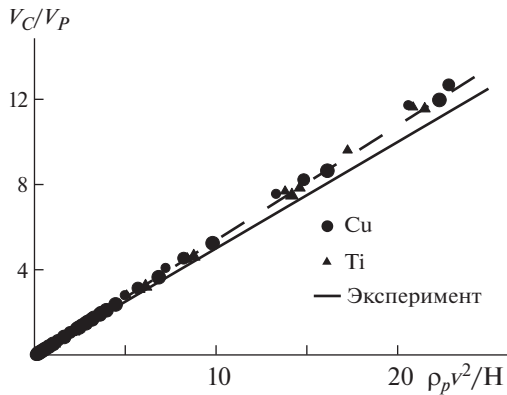


Рис. 1. Зависимость отношения объема кратера к объему нанокластера от безразмерного энергетического параметра. Аппроксимация результатов численного моделирования обозначена штриховой линией. Данные для медных нанокластеров различного диаметра обозначены кругами различного размера, данные для титановых нанокластеров различного диаметра обозначены треугольниками различного размера. Прямая сплошная линия соответствует аппроксимационной зависимости Н.А. Златина.

Размер металлической подложки выбирался достаточно большим, чтобы минимизировать влияние границ на характер исследуемых явлений. Также на все атомы, находящиеся в десяти крайних атомных плоскостях по бокам и снизу подложки, действовала искусственная вязкость, что позволило полностью поглотить ударные волны, инициируемые ударом кластера о подложку. Размеры медной и титановой подложки составляли $54 \times 54 \times 22$ нм и $70 \times 70 \times 25$ нм соответственно. Кристаллографическая ориентация медной подложки (001), а титановой подложки (1–2 0).

В результате удара кластера в подложке образовывался кратер с приподнятыми краями. При оценке объема и глубины кратера приподнятые края кратера отсекались по уровню невозмущенной верхней плоскости подложки. Для каждого значения скорости анализ данных позволил определить максимальный размер кратера.

Для моделирования межатомного взаимодействия в рассматриваемых металлах был использован метод внедренного атома (Embedded Atom Method – EAM) [11–13]. Выражение для потенциальной энергии имеет вид

$$U = \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\bar{\rho}_i), \quad (1)$$

где U – полная потенциальная энергия системы, ϕ_{ij} – парный потенциал взаимодействия, а r_{ij} – расстояние между атомами i и j .

Функция $F_i(\bar{\rho}_i)$ – это энергия внедрения атома i , а $\bar{\rho}_i$ – это электронная плотность в месте нахождения атома i , вызванная присутствием остальных

атомов в системе; $\bar{\rho}_i$ является монотонно убывающей функцией от межатомного расстояния r_{ij} и определяется как

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}). \quad (2)$$

Для атома i функции $\bar{\rho}_i$ и $\sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij})$ рассчитываются путем перебора всех ближайших соседей, а затем выполняется однократный расчет функции $F_i(\bar{\rho}_i)$. Нелинейность $F_i(\bar{\rho}_i)$ обеспечивает многоатомный вклад в выражение полной энергии межатомного взаимодействия. В настоящей работе были использованы таблично заданные функции ρ_j , ϕ_{ij} и F_i . Для аппроксимации этих функций при численном решении уравнений движения были использованы локальные В-сплайны [14–18].

Интегрирование уравнения движения проводилось с использованием скоростной модификации схемы Верле второго порядка точности по временному шагу, шаг по времени в численном расчете составлял 0.1 фс. Для численного моделирования был использован разработанный параллельный алгоритм, который позволяет осуществлять расчеты с использованием графических процессоров (ГПУ) общего назначения компании NVIDIA, поддерживающих технологию CUDA (Compute Unified Device Architecture) [19–21].

РЕЗУЛЬТАТЫ

Многочисленные экспериментальные данные по высокоскоростному ударному взаимодействию сферического ударника с преградой позволили сформулировать следующую фундаментальную концепцию (так называемый энергетический критерий): объем кратера остается пропорциональным энергии ударника и обратно пропорциональным динамической прочности материала [22–24].

На основе проведенных численных экспериментов были построены зависимости безразмерного объема кратера от безразмерного энергетического параметра. Результаты моделирования для всех размеров нанокластеров титана и меди расположены на единой прямой $V_C/V_P = K_V(\rho_P \cdot v^2/H)$, где константа $K_V = 0.55$, V_C – объем кратера, V_P , ρ_P , v – объем, плотность и скорость сферического ударника, H – динамическая твердость материала подложки (штриховая линия, рис. 1).

На основе данных, представленных в [1], была построена аппроксимационная зависимость Н.А. Златина для безразмерного объема (рис. 1), которая также является прямой, но с угловым коэффициентом $K_V = 0.5$. Расхождения в угловых коэффициентах прямых связаны с неточностью обра-

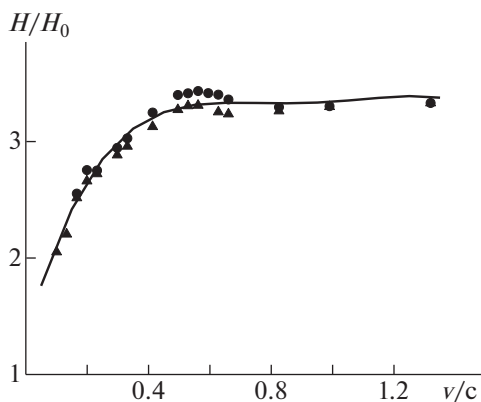


Рис. 2. Зависимость безразмерной динамической твердости титана от безразмерной скорости нанокластера. Круги соответствуют результатам расчетов для нанокластеров 9.8 нм, а треугольники — 11.8 нм. Сплошная линия — аппроксимационный полиномом четвертой степени с коэффициентами: $A_0 = 1.278$, $A_1 = 9.454$, $A_2 = -16.302$, $A_3 = 12.123$, $A_4 = -3.261$.

ботки экспериментальных данных и математической модели в расчетах ММД.

Динамическая твердость материала H определяется в соответствии с энергетическим определением, предложенным Д. Тейбором и соавт. [25–27]:

$$H = E_K/V_C, \quad (3)$$

где E_K — кинетическая энергия ударника.

В качестве примера, на рис. 2 представлены зависимости безразмерной динамической твердости от скорости, приведенной к скорости звука в титане. Динамическая твердость нормировалась на величину твердости H_0 , полученную в процессе наноиндентирования титана при статических условиях нагружения индентора [28]. В интервале рассматриваемых скоростей удара результаты численных экспериментов были аппроксимированы полиномом четвертой степени (сплошная линия на рис. 2). Из представленных зависимостей видно, что динамическая твердость зависит от скорости соударения нанокластера.

Первоначально увеличение скорости удара нанокластера с подложкой приводит к быстрому увеличению динамической твердости по сравнению со статической. В диапазоне скоростей соударения $0 < v/c < 0.5$ происходит переход материала от упругого взаимодействия к пластическому. Это наиболее интересный интервал нагружения, и он требует дальнейших исследований. При увеличении $v/c > 0.5$ происходит выход динамической твердости преграды на асимптотику, т.е. $H \approx 3.2H_0$.

Как правило, при решении задач соударения тел в континуальной механике динамическую твердость определяют на основе статической твердости или статического предела текучести материала, вводя специальные постоянные или зависящие от скорости соударения поправочные коэффициенты. В настоящей работе было пред-

ложено энергетическое определение динамической твердости материала, основанное лишь на точных измерениях объема кратера в численных экспериментах.

Таким образом, в математических моделях, описывающих поведение материала, необходимо учитывать зависимость динамической твердости H от скорости нагружения, т.е. $H = H_0 \cdot \phi(v/c)$, где функция $\phi(v/c)$ может быть рассчитана на основе модельной задачи о соударении нанокластера с преградой на основе ММД.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе в рамках метода молекулярной динамики были проведены численные эксперименты по исследованию ударного взаимодействия металлических нанокластеров различного размера с металлической подложкой в широком диапазоне скоростей (материал нанокластера и подложки совпадал).

Используя энергетическое определение динамической твердости H , предложенное Тейбором, и основываясь на точных измерениях объема кратера в численных экспериментах, были найдены зависимости H от скорости удара для различных размеров нанокластера.

Результаты численного моделирования для всех размеров нанокластеров исследуемых металлов находятся на единой общей прямой, обобщающей экспериментальные данные: $V_C/V_P = K_V(\rho_P \cdot v^2/H)$.

БЛАГОДАРНОСТИ

Часть работы выполнена с использованием оборудования ЦКП “Механика” (ИТПМ СО РАН). Для вы-

полнения части расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП “Центр данных ДВО РАН”.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00733, <https://rscf.ru/project/21-19-00733/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Златин Н.А., Красильщиков А.П., Мишин Г.И. Баллистические установки и их применение в экспериментальных исследованиях. М.: Наука, 1974.
2. Bruce E.P. Review and analysis of high velocity impact data // Proc. 5th Symposium on Hypervelocity Impact. Denver, USA, 1961. P. 439–474.
3. Herrmann W., Jones A.H. Correlation of hypervelocity impact data // Proc. 5th Symposium on Hypervelocity Impact. Denver, USA, 1961. P. 389–439.
4. Holsapple K.A. The scaling of impact phenomena // Intern. J. Impact Engineering. 1987. V. 5. Iss. 1–4. P. 343–355.
5. Denardo B.P., Summers J.L., Nysmith C.R. Projectile size effects on hypervelocity impact craters in aluminum // NASA technical note D-4067. 1967.
6. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Amsterdam: Elsevier Academic Press, 2001.
7. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Oxford University Press, 1987.
8. Germann T.C. Large-scale molecular dynamics simulations of hyperthermal cluster impact // Intern. J. Impact Engineering. 2006. V. 33. Iss. 1–12. P. 285–293.
9. Ma Xn-Ling, Yang Wei. Supersonic wave propagation in Cu under high-speed cluster impact // Nanotechnology. 2004. V. 15. № 5.
10. Pogorelko V.V., Krasnikov V.S., Mayer A.E. High-speed collision of copper nanoparticles with aluminum surface: Inclined impact, interaction with roughness and multiple impact // Computational Materials Science. 2018. V. 142. P. 108–121.
11. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B 29. 1984. 6443. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
12. Voter A.F. Embedded Atom Method Potentials for Seven FCC Metals: Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, and Al. // Los Alamos Unclassified Technical Report LA-UR-93-3901. 1993.
13. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system // Phys. Rev. B 68 024102. 2003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102>
14. Golovnev I.F., Golovneva E.I., Utkin A.V. Effect of the nanorod size on energy absorption at the microlevel under cyclic loading // Physical Mesomechanics. 2019. V. 22. № 5. P. 420–431. <https://doi.org/10.1134/S1029959919050084>
15. Golovnev I., Golovneva E., Utkin A. Molecular-dynamics investigation of the initial failure of the nanosized rod under uniaxial cyclic load // Engineering Failure Analysis. 2019. V. 105. P. 672–687. <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2019.07.040>
16. Golovnev I.F., Golovneva E.I., Utkin A.V. A study into the temperature and size effects in nanostructures on their fracture under external mechanical loads // Physical Mesomechanics. 2018. V. 21. № 6. P. 523–528. <https://doi.org/10.1134/S1029959918060073>
17. Golovnev I.F., Golovneva E.I. A study of the radius dependence of thermodynamic parameters for metal nanospheres // Physical Mesomechanics. 2020. V. 23. № 3. P. 189–192. <https://doi.org/10.1134/S1029959920030017>
18. Golovnev I.F., Golovneva E.I. Calculation of the temperature dependence of the surface energy of metal nanoclusters in a wide range of their radii // Physical Mesomechanics. 2020. V. 23. № 4. P. 316–323. <https://doi.org/10.1134/S1029959920040050>
19. Utkin A.V., Fomin V.M., Golovneva E.I. Parallel molecular dynamics for silicon and silicon carbide: MPI, CUDA and CUDA-MPI implementation // AIP Conference Proceedings: High-Energy Processes in Condensed Matter. AIP Publishing, 2020. V. 2288. P. 030083(12). <https://doi.org/10.1063/5.0028297>
20. Utkin A.V. Analysis of parallel molecular dynamics for MPI, CUDA and CUDA-MPI implementation // Mathematica Montisnigri 2017. V. 39. P. 101–109. WoS: 000419276200008
21. Ozhgibesov M.S., Leu T.S., Cheng C.H., Utkin A.V. Studies on argon collisions with smooth and rough tungsten surfaces // J. Molecular Graphics and Modelling. 2013. V. 45. P. 45–49.
22. Herrmann W., Wilbeck J.S. Review of hypervelocity penetration theories // Intern. J. Impact Engineering. 1987. V. 5, Issues 1–4. P. 307–322.
23. Shanbing Yu, Gengchen Sun, Qingming Tan. Experimental laws of cratering for hypervelocity impacts of spherical projectiles into thick target // Intern. J. Impact Engineering. 1994. V. 15. Iss. 1. P. 67–77.
24. Baker J.R. Hypervelocity crater penetration depth and diameter – a linear function of impact velocity? // Intern. J. Impact Engineering. 1995. V. 17. Iss. 1–3. P. 25–35.
25. Tabor D. The Hardness of Metals. Oxford: Oxford University Press, 1951.
26. Tirupataiah Y., Sundararajan G. A dynamic indentation technique for the characterization of the high strain rate plastic flow behaviour of ductile metals and alloys // J. Mechanics and Physics of Solids. 1991. V. 39. Iss. 2. P. 243–271.
27. Koepfel B.J., Subhash G. Characteristics of residual plastic zone under static and dynamic Vickers Indentations // Wear. 1999. V. 224. P. 56–67.
28. Verkhovtsev A.V., Yakubovich A.V., Sushko G.B., Hanauske M., Solov'yov A.V. Molecular dynamics simulations of the nanoindentation process of titanium crystal // Computational Materials Science. 2013. V. 76. P. 20–26.

MOLECULAR DYNAMIC STUDY OF THE CRATERING PROCESS DURING HIGH-VELOCITY IMPACT OF METALLIC CLUSTERS WITH A SUBSTRATE

A. V. Utkin^a and Academician of the RAS V. M. Fomin^{a,b}

*^aKhristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
Novosibirsk, Russia*

^bNovosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

In the presented work, numerical experiments were carried out in the framework of the molecular dynamics method to study the impact interaction of metallic nanoclusters of different sizes with a metallic substrate in a wide range of velocities. Analysis of the obtained data showed that the crater volume remains proportional to the impact energy and inversely proportional to the dynamic strength of the material, with the direct angle coefficient being independent of the cluster size and the cluster-substrate material.

Keywords: molecular dynamics, impact, nanostructure, nanocluster