

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ СТРУКТУРЫ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В МЕТАЛЛАХ С ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ

А.В. Болеста, В.М. Фомин

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

В докладе приводится сравнительный молекулярно-динамический (МД) анализ поведения при ударно-волновом нагружении двух нанокристаллических металлов, обладающих различными кристаллическими структурами при обычных условиях. Это медь и титан с гранцентрированной кубической (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной решеткой (ГПУ) соответственно. В то же время оба эти материала демонстрируют твердотельный фазовый переход при определенной силе ударной волны. Структура меди меняется на объемно-центрированную кубическую (ОЦК) решетку при давлении в ударной волне больше 100 ГПа, что было предсказано нами ранее теоретически и экспериментально может быть показано в настоящий момент лишь косвенным образом. Смена кристаллической структуры титана демонстрировалась ранее экспериментально и происходит при давлении больше примерно 30 ГПа. МД расчеты позволяют выявить различия в структуре и ширине фронта ударной волны в этих двух металлах. Большое внимание было уделено исследованию механизмов деформации и структурных превращений в режимах нагружения вблизи фазовых переходов. Также показана возможность использования фазового перехода за ударной волной с дальнейшей разгрузкой для конструирования нанокристаллических материалов с уменьшенным размером зерна.

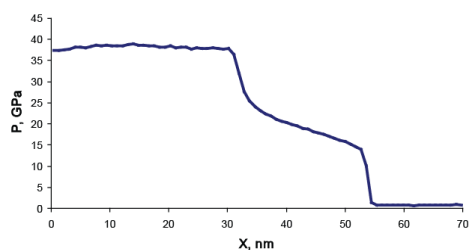


Рис. 1 Структура фронта ударной волны в титане.
Распределение давления.

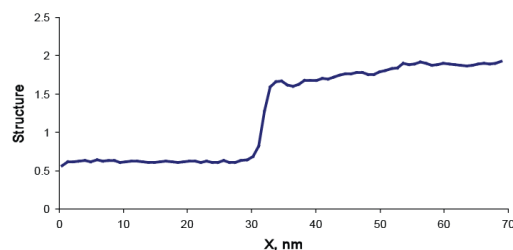


Рис.2 Структура фронта ударной волны в титане.
Распределение среднего структурного числа.