

Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

A. Yu. Kuksin, H. E. Norman, V. V. Pisarev, V. V. Stegailov,
A. V. Yanilkin, A kinetic model of fracture of simple liquids, *TVT*, 2010,
Volume 48, Issue 4, 536–543

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.14.81

March 17, 2025, 05:02:37



УДК 539.424

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАЗРУШЕНИЯ ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ

© 2010 г. А. Ю. Куксин, Г. Э. Норман, В. В. Писарев, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин

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

Поступила в редакцию 04.05.2009 г.

Проведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование процессов зарождения и роста полостей в растянутой леннард-джонсовской жидкости. Рассмотрен процесс гомогенного зарождения полостей в ячейке постоянного объема. На основе усреднения времени жизни гомогенной фазы по ансамблю МД-траекторий определена частота нуклеации в зависимости от давления и температуры. Выполнено сопоставление полученной зависимости с классической теорией гомогенной нуклеации. Проведено моделирование начального этапа роста сферической полости, определена зависимость скорости роста от давления вдоль двух изотерм. Предложена кинетическая модель разрушения жидкости при растяжении с постоянной скоростью. Она связывает объем пор в произвольный момент времени с кинетическими характеристиками их зарождения и роста, определенными в МД-моделях для единичных изолированных полостей. Рассчитанная на основе данной кинетической модели и МД-данных откольная прочность жидкости слабо зависит от скорости растяжения. Результаты расчетов хорошо соответствуют экспериментальной зависимости откольной прочности гексана от скорости растяжения.

ВВЕДЕНИЕ

Под разрушением (или кавитацией) жидкости понимается нарушение ее сплошности под действием растягивающего давления. Жидкости в растянутом состоянии встречаются как в природе (например, в вершинах высоких деревьев), так и в технике (под действием ультразвука, при быстром энерговыделении в проектируемых реакторах инерционного термоядерного синтеза). Также метастабильная жидкая фаза часто возникает в твердом теле в результате интенсивного импульсного энерговыклада: при лазерной абляции [1, 2] или в экспериментах с ударными волнами [3]. При этом возникает потребность изучить прочность жидкости при растяжении и предложить методы ее предсказания в достаточно широком диапазоне времен длительности импульса растяжения: от нескольких пикосекунд до микросекунд.

В данной работе рассмотрено разрушение жидкости под действием импульсного растяжения, характерного для ударно-волновых экспериментов. При отражении ударно-волнового импульса сжатия от свободной поверхности жидкости в ней создаются растягивающие напряжения, вызывающие появление полостей и возможный откол [4–7].

Прочность жидкости в разных случаях может определяться как гетерогенными процессами, протекающими на границе фаз (например, на взвешенных частицах примеси, газовых пузырьках), так и гомогенным зарождением и ростом пор в объеме жидкости. Для типичных длительностей импульсов воздействия ~ 1 мкс влияние границ исключается

и разрушение происходит в тонком слое вещества, что значительно уменьшает количество гетерогенных очагов [5]. Кроме того, предварительное сжатие в ударной волне приведет к частичному схлопыванию пор, что также повышает роль гомогенного зародышеобразования. Поскольку скорость разрушения за счет гетерогенных процессов определяется концентрацией примесей, а скорость появления гомогенных зародышей резко растет с увеличением степени растяжения, то при высоких скоростях растяжения разрыв жидкости инициируется, в основном, за счет гомогенных процессов.

При теоретическом описании и численном моделировании процессов разрушения используется два основных подхода. Первый – рассмотрение разрушения за счет зарождения полостей [5–8]. Скорость этого процесса обычно вычисляется по формулам теории гомогенной нуклеации [9, 10]. Второй подход – использование критериев на основе баланса энергии [11] или импульса [12]. Эти два подхода могут применяться как по отдельности [5–8], так и вместе [13, 14].

В данной статье рассматривается механизм разрушения, состоящий из гомогенной нуклеации пузырьков в жидкости и последующего роста образовавшихся полостей. Молекулярно-динамические (МД) расчеты позволяют проследить процесс разрушения на атомистическом уровне [15], определить кинетические параметры зарождения и роста пор [16]. Полученные кинетические зависимости используются в модели типа “нуклеация и рост полостей” (nucleation and growth, NAG) [16]

для определения откольной прочности жидкости. Такой подход позволяет выйти за рамки временных и пространственных масштабов, доступных методу молекулярной динамики.

МОДЕЛЬ

В работе рассматриваются простые жидкости, под которыми принято понимать однокомпонентные атомарные жидкости и, с некоторыми оговорками, жидкости из сферически-симметричных молекул, связанных центральными вандер-ваальсовскими силами. Для МД-моделирования простых жидкостей широко используется межчастичный парный потенциал взаимодействия Леннарда-Джонса:

$$U(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], & r < r_{\text{cut}} \\ 0, & r \geq r_{\text{cut}} \end{cases}$$

Здесь $U(r)$ – потенциальная энергия взаимодействия двух частиц, находящихся на расстоянии r друг от друга, а σ и ϵ – параметры, определяющиеся выбором конкретного вещества. Радиус обрезания потенциала брался равным $r_{\text{cut}} = 4.0\sigma$. Для устранения поверхностных эффектов использовались периодические граничные условия. Расчеты проводились с использованием МД-пакета LAMMPS [17].

В дальнейшем температура, давление, плотность и другие величины будут указываться в безразмерных единицах: $T^* = kT/\epsilon$, $P^* = P\sigma^3/\epsilon$, $\rho^* = \rho\sigma^3/m$, где m – масса частицы, k – постоянная Больцмана. Время будет указываться в единицах $\tau = (m\sigma^2/\epsilon)^{1/2}$.

В работе изучается поведение метастабильной жидкости при отрицательных давлениях. Область ее существования ограничена спинодалью со стороны низких плотностей (при растяжении) и кинетической границей стабильности по отношению к кристаллизации со стороны высокой плотности (что эквивалентно переохлаждению). Сближение этих линий происходит для леннарда-джонсовской жидкости при $T^* < 0.3$ [18, 19], в статье же рассматриваются температуры T^* от 0.5 до 0.75. Верхняя граница чуть выше тройной точки $T_{\text{tr}}^* \approx 0.7$.

ЧАСТОТА ГОМОГЕННОЙ НУКЛЕАЦИИ

Нуклеация – это начальная стадия любого фазового перехода первого рода. При гомогенной нуклеации в объеме однофазной системы происходит появление зародышей новой фазы. Скорость спонтанного фазового перехода характеризуется средним числом критических зародышей, образующихся в единице объема вещества в еди-

ницу времени – частотой нуклеации [9, 10]. Она определяется как $J = \frac{1}{\langle \tau \rangle V}$, где $\langle \tau \rangle$ – среднее время жизни однородной фазы (время до появления критического зародыша), V – объем системы.

В МД-расчетах растянутая жидкость получалась путем плавления простой кубической решетки, нестабильной для потенциала Леннарда-Джонса, и затем выводилась на равновесие при заданной температуре. Плотность жидкости выбиралась так, чтобы давление в системе было отрицательным. Получившееся состояние являлось исходным для последующего расчета. При запуске расчета из этого состояния в жидкости через некоторое время самопроизвольно появлялась полость. Установление максвелловского распределения в леннарда-джонсовской жидкости происходит за время $\Delta t_{\text{eq}} \sim \tau$ [20], а время жизни однородной фазы составляло в расчетах $\Delta t \sim 100\tau$. Поэтому практически на всем участке МД-траектории до появления в ячейке критического зародыша система находится в состоянии термодинамического равновесия. Однако равновесие является неполным: система неравновесна по отношению к появлению зародышей новой фазы [9, 10]. Среднее время жизни однородной фазы находилось по методу, предложенному в [21]: Он состоит в усреднении времен жизни по ансамблю независимых МД-траекторий, соответствующих одному макросостоянию. В данном случае под макросостоянием понималась комбинация температуры T^* и давления P^* в системе. Время жизни метастабильной фазы в отдельном расчете определялось по резкому увеличению давления, которое сопровождается появлением и ростом пузырька. Поскольку система уравнений движения множества частиц является экспоненциально неустойчивой (хаотической), то МД-траектории, стартующие из одного и того же начального состояния с разными шагами интегрирования, экспоненциально расходятся со временем [22]. Поэтому для создания ансамбля независимых МД-траекторий, равновесные участки которых соответствуют одному макросостоянию, использовалось интегрирование с разными шагами из одной начальной конфигурации [21]. Шаг интегрирования менялся в пределах $(1.7-2.3) \times 10^{-3} \tau$.

Предположим, что появление зародыша в системе происходит случайным образом, а среднее время жизни гомогенной фазы в расчетной ячейке не зависит от момента, в который начинается наблюдение. Тогда распределение траекторий по временам жизни подчиняется закону экспоненциального распада $N(t) = N_0 \exp\left(-\frac{t}{\langle \tau \rangle}\right)$ [9, 21]. Рисунок 1 показывает соответствие результатов расчетов и этой модели нуклеации.

Были определены зависимости $J(P)$ на трех изотермах: $T^* = 0.52$, $T^* = 0.71$ и $T^* = 0.75$ (рис. 2).

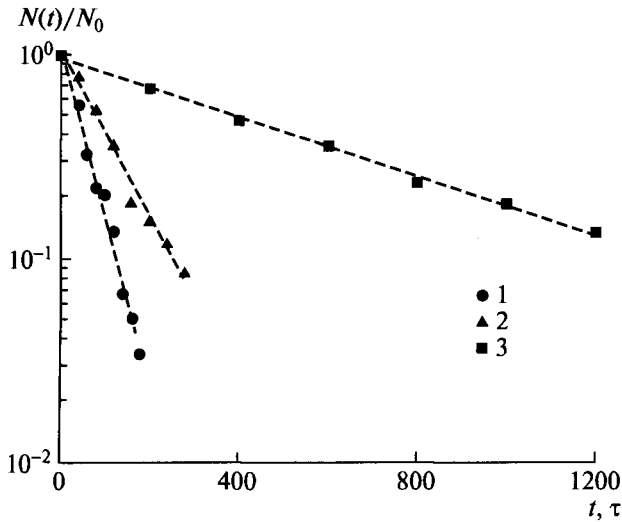


Рис. 1. Распределение траекторий по временам жизни при $T^* = 0.71$: 1 – $\rho^* = 0.727$, $\langle \tau \rangle = 57$; 2 – $\rho^* = 0.730$, $\langle \tau \rangle = 110$; 3 – $\rho^* = 0.740$, $\langle \tau \rangle = 600$.

При этом использовалось число частиц в расчетной ячейке от 8000 (в области высокой скорости нуклеации) до 216000 (в области низкой скорости нуклеации). Зависимость частоты нуклеации от давления на изотерме имеет тот же вид, что и в классической теории гомогенной нуклеации [9, 10]:

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right), \quad (1)$$

где $W = \frac{16\pi\gamma^3}{3(P - P')^2}$ – работа образования критического зародыша, γ – поверхностное натяжение на границе критического зародыша, P – давление в жидкости, P' – давление пара внутри пузырька.

При сравнении результатов моделирования (точки на рис. 2) с (1) полагалось, что давление в жидкой фазе равно среднему давлению на равновесном участке траектории, а давлением газа в пузырьке можно пренебречь. Действительно, критическая температура для леннард-джонсовской системы составляет $T_{cr}^* \approx 1.3$ [18, 19]. Рассматриваемые температуры заметно ниже критической, поэтому давление насыщенного пара мало и небольшие пузырьки являются практически пустыми.

Параметры J_0 и γ , определенные из зависимости $J(P)$, для исследованных температур составляют (соответствующие аппроксимации представлены на рис. 2 линиями):

$$T^* = 0.52: \ln J_0^* = (10.7 \pm 2.0),$$

$$J_0 \approx 4.4 \times 10^4 \sigma^{-3} \tau^{-1}, \quad \gamma = (1.16 \pm 0.03) \varepsilon / \sigma^2;$$

$$T^* = 0.71: \ln J_0^* = (12.6 \pm 1.3),$$

$$J_0 \approx 2.9 \times 10^5 \sigma^{-3} \tau^{-1}, \quad \gamma = (0.87 \pm 0.02) \varepsilon / \sigma^2;$$

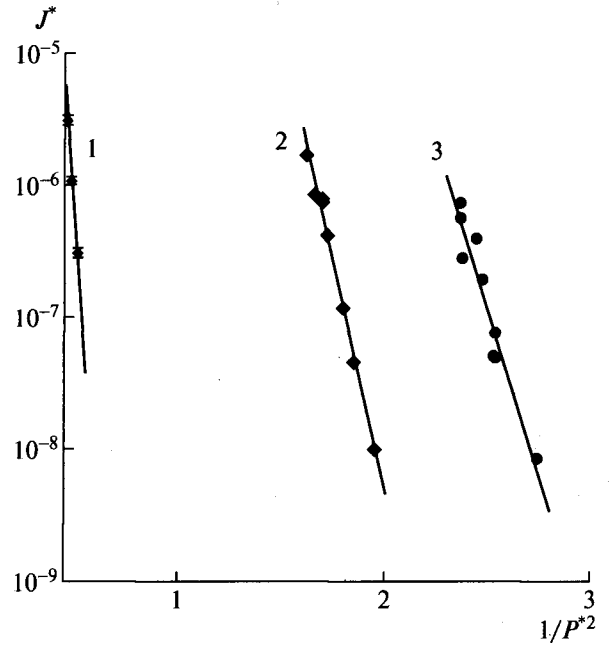


Рис. 2. Зависимость частоты нуклеации от давления: 1 – $T^* = 0.52$, 2 – $T^* = 0.71$, 3 – $T^* = 0.75$.

$$T^* = 0.75: \ln J_0^* = (13.1 \pm 3.1),$$

$$J_0 \approx 3.6 \times 10^5 \sigma^{-3} \tau^{-1}, \quad \gamma = (0.80 \pm 0.03) \varepsilon / \sigma^2.$$

Таким образом, зависимость частоты нуклеации от давления при высоких степенях метастабильности может быть представлена в форме, даваемой классической теорией нуклеации. Численное значение γ , как будет показано дальше, совпадает с величиной поверхностного натяжения жидкости (рис. 3).

ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ

Были сделаны оценки поверхностного натяжения жидкости в исследованной области фазовой диаграммы. Для этого система выводилась при фиксированном объеме на заданную температуру, затем в ней путем удаления частиц вырезалась сферическая полость и проводился МД-расчет. Полости с различным начальным размером могут либо расти, либо схлопываться. Это зависит от соотношения начального радиуса полости и критического радиуса, даваемого формулой Лапласа:

$$R_{cr} = -\frac{2\gamma}{P}. \quad (2)$$

Если начальный радиус полости больше критического, то она растет, если меньше – схлопывается. Вырезая полости различного размера и наблюдая их эволюцию, можно определить диапазон, в котором находится критический радиус, и оценить поверхностное натяжение по формуле (2).

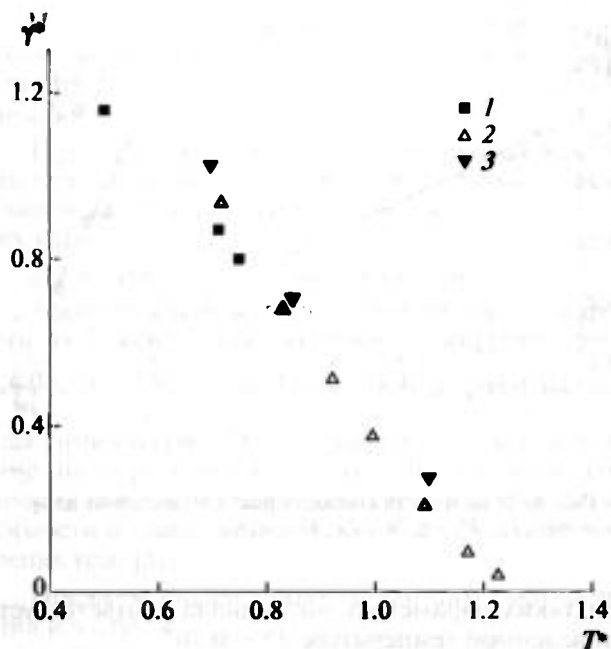


Рис. 3. Зависимость поверхностного натяжения от температуры: 1 – данная работа, $r_{crit} = 4.0\sigma$; 2 – [23], $r_{crit} = 6.78\sigma$; 3 – [24], $r_{crit} = 5.0\sigma$.

В области давлений, где была исследована зависимость частоты нуклеации от давления, такая оценка дает следующие значения поверхностного натяжения:

$$\gamma \approx (1.18 \pm 0.04) \epsilon / \sigma^2 \text{ при } T^* = 0.5,$$

$$\gamma \approx (0.86 \pm 0.04) \epsilon / \sigma^2 \text{ при } T^* = 0.71.$$

Эти величины соответствуют значениям параметра γ , полученного из зависимости частоты нуклеации от давления. Таким образом, двумя независимыми способами была получена одинаковая оценка величины поверхностного натяжения, что показывает достоверность МД-подхода. На рис. 3 приведено сравнение результатов, полученных по наклону кривых $J(P)$, с поверхностным натяжением, рассчитанным по профилю давления в плоском слое жидкости из работ [23, 24]. Рассчитанные величины дают недооценку поверхностного натяжения по сравнению с его величиной на плоской границе раздела. Снижение поверхностного натяжения связано с тем, что в исследованной области давлений радиус критической полости составляет несколько межмолекулярных расстояний, и необходимо учитывать зависимость поверхностного натяжения от кривизны поверхности [9, 25, 26]. Эта зависимость в наиболее простой форме представляется формулой Толмена [9, 25]

$$\gamma = \frac{\gamma_\infty}{1 + 2\delta/R}, \quad (3)$$

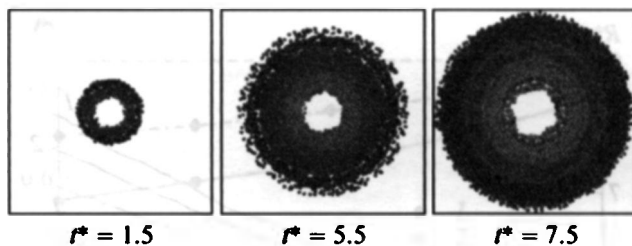


Рис. 4. Срез расчетной ячейки в различные моменты времени. Показана область, охваченная возмущением от растущей полости. Раскраска сферического слоя соответствует величине потока радиальной компоненты импульса через этот слой.

где γ_∞ – поверхностное натяжение на плоской границе раздела, R – эквивалентный радиус полости, δ – параметр.

Подстановка значений поверхностного натяжения на плоской границе и на границе полости в формулу (3) дает оценку величины $\delta \approx (0.06 \pm 0.03)\sigma$.

СКОРОСТЬ РОСТА ПОЛОСТЕЙ

Для исследования скорости роста полости в жидкости использовался следующий метод. Вначале система выводилась при фиксированном объеме на заданную температуру, затем в ней вырезалась сферическая полость и проводился МД-расчет эволюции полости во времени. Для определения объема полости вся расчетная ячейка покрывалась равномерной сеткой клеток. Размер клетки брался таким, чтобы в нее в среднем попадало две леннард-джонсовские частицы. Каждая частица представлялась кубиком со стороной, меньшей ребра клетки. Клетка считалась пустой, если она не пересекалась ни с одной частицей. Объем полости принимался равным суммарному объему пустых клеток. Радиус полости вычислялся по формуле

$$r(t) = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi} V_c(t)}.$$

Для исследования кинетики роста рассматривался только начальный участок траектории, пока возмущение от полости не достигло границ расчетной ячейки (рис. 4). До этого момента полость расширяется так же, как и в неограниченной среде. Затем давление в системе начинает выравниваться и условия расчета уже не соответствуют расширению в бесконечной среде из-за использования периодических граничных условий.

Зависимость радиуса полости от времени приведена на рис. 5. Полученная зависимость близка к линейному росту с постоянной скоростью. Поскольку в данной работе исследовался только начальный этап роста, то нельзя утверждать, что за-

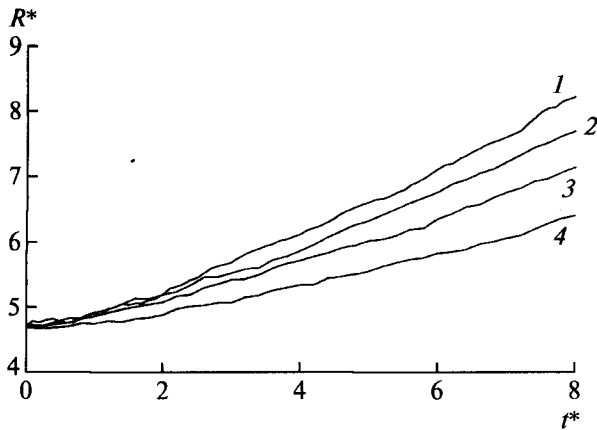


Рис. 5. Зависимость радиуса полости от времени при $T^* = 0.52$: 1 - $P^* = -1.42$, 2 - $P^* = -1.32$, 3 - $P^* = -1.30$, 4 - $P^* = -1.09$.

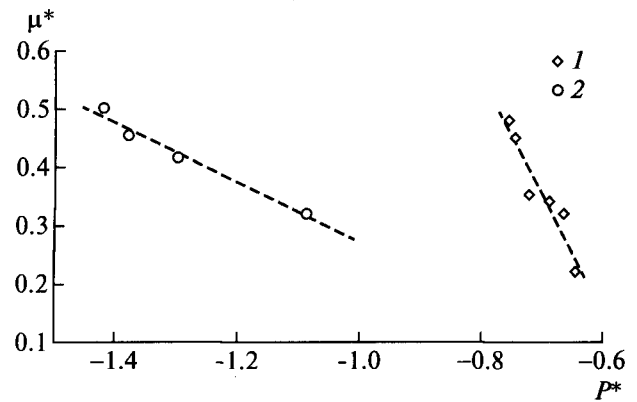


Рис. 6. Зависимость скорости роста полостей от давления: 1 - $T^* = 0.707$, 2 - $T^* = 0.52$.

висимость отличается от экспоненциальной, характерной для вязкостного роста [27]:

$$\frac{r}{r_0} = \exp\left(\frac{-P}{4\eta}t\right),$$

где r_0 — начальный радиус полости, η — динамическая вязкость жидкости.

Зависимость скорости роста полостей μ от давления, рассчитанная в предположении линейного закона роста $r(t)$, при различных температурах приведена на рис. 6.

МОДЕЛЬ РАЗРУШЕНИЯ

Полученные зависимости частоты нуклеации и скорости роста полостей от давления и температуры были использованы для определения прочности жидкости в режиме растяжения с постоянной скоростью $\dot{\epsilon} = \frac{\dot{V}}{V_0}$ и при постоянной температуре. Результаты сопоставляются с данными по откольной прочности гексана из экспериментов [5]. Интенсивность ударных волн в этих экспериментах была сравнительно небольшой (давления в импульсе сжатия до ~ 700 МПа), поэтому изменение температуры в ударной волне и последующих волнах разрежения мало: разница между температурой перед моментом откола и начальной около 10 К [5]. Соответственно, изменением температуры в процессе адиабатического растяжения можно пренебречь.

Параметры потенциала Леннард-Джонса для гексана составляют [28]: $\epsilon/k = 413$ К, $\sigma = 5.909$ Å. Начальная температура в экспериментах $T_0 = 292$ К

при таких параметрах потенциала соответствует приведенной температуре $T^* = 0.707$.

Для описания разрушения применялась следующая модель [16]. Объем полостей в произвольный момент времени равен

$$V_{\text{cav}}(t) = \int_0^t v_{\text{cav}}(t - \tau) \dot{n}(\tau) d\tau,$$

где $v_{\text{cav}}(t - \tau)$ — объем одной полости, зародившейся в момент времени τ , а $\dot{n}(\tau)$ — частота появления полостей.

Входящие под знак интеграла величины выражаются через частоту нуклеации J и скорость роста μ следующим образом:

$$v_{\text{cav}}(t - \tau) = \frac{4\pi}{3} \left(R_{\text{cr}}(\tau) + \int_{\tau}^t \mu(P(\zeta)) d\zeta \right)^3,$$

$$\dot{n}(\tau) = J(P(\tau)) V_0.$$

Радиус критического зародыша R_{cr} при расчетах вычислялся по формуле (2). За момент откола t_{sp} принимаем тот момент времени, когда скорость увеличения объема полостей сравнивается со скоростью деформирования: $\frac{1}{V_0} \frac{dV_{\text{cav}}}{dt}(t_{\text{sp}}) = \dot{\epsilon}$.

По известной зависимости $P(t)$ находим значение давления в момент откола, которому мы придаем смысл откольной прочности.

Для определения зависимости давления от времени использовалась формула $P(t) = P\left(\frac{P_0}{1 + \dot{\epsilon}t}, T\right)$, где $P(\rho, T)$ — уравнение состояния жидкости в рассматриваемой модели. Температура полагалась постоянной, а давление $P(\rho)$ вдоль изотерм было рассчитано методом МД.

На рис. 7 представлены результаты расчетов откольной прочности леннард-джонсовской жидкости при $T^* = 0.71$, сделанных в двух разных предположениях:

1) разрушение обусловлено нуклеацией критических зародышей, а их рост не дает существенного вклада в увеличение пористости (т.е. полагаюсь $\mu = 0$);

2) разрушение с учетом роста полостей.

Зависимость откольной прочности от скорости растяжения хорошо аппроксимируется формулой $P_s = \frac{A}{\sqrt{\ln B/\dot{\epsilon}}}$ (сплошная и штрихпунктирная линии на рис. 7). В случае 1 данное соотношение непосредственно следует из классической теории нуклеации в предположении слабой зависимости размера критического зародыша от давления (см. [5]).

Покажем справедливость данного соотношения и в случае 2.

Скорость нарастания объема полости радиуса R равна

$$\dot{V}_{cav}(\tau) = 4\pi R^2(\tau)\dot{R}.$$

Для N одинаковых полостей

$$\dot{V}_{cav} = 4\pi R^2\dot{R}N.$$

В интервале времени $(t; t + dt)$ зарождается $dN = \dot{n}(t)dt$ полостей. К моменту откола (т.е. времени роста полостей равно $t_{sp} - t$) скорость нарастания их объема составляет

$$\begin{aligned} d\dot{V}_{cav}(t) &= \dot{V}_{cav}(t_{sp} - t)dN(t) = \\ &= 4\pi[R(t_{sp} - t)]^2\dot{R}\dot{n}(t)dt, \end{aligned}$$

где $\dot{n}(t)$ — скорость зарождения полостей в момент времени t , $R(t_{sp} - t)$ — радиус полости к моменту времени t_{sp} , \dot{R} — скорость роста полости. Предположим слабую зависимость откольной прочности от скорости растяжения и линейную зависимость давления от времени:

$$P = -K_T\dot{\epsilon}t,$$

где K_T — модуль всестороннего сжатия жидкости. Тогда из $P_s \approx \text{const}$ следует, что $\dot{\epsilon}t_{sp} \approx \text{const}$. При $t \approx t_{sp}$ можно считать $\dot{R} \approx \mu(t_{sp}) = \mu_0$. Тогда $R(t_{sp} - t) \approx \mu_0(t_{sp} - t)$. Таким образом, получаем

$$d\dot{V}_{cav}(t) \propto [\mu_0(t_{sp} - t)]^2 \mu_0 \dot{n}(t) dt.$$

Скорость зарождения полостей определяется частотой нуклеации:

$$\dot{n}(t) \propto J(P(t)) \propto \exp\left(-\frac{b^2}{P^2(t)}\right) = \exp\left(-\frac{a^2}{t^2}\right).$$

Тогда при $t < t_{sp}$

$$d\dot{V}_{cav}(t) \propto (t_{sp} - t)^2 \exp\left(-\frac{a^2}{t^2}\right) dt.$$

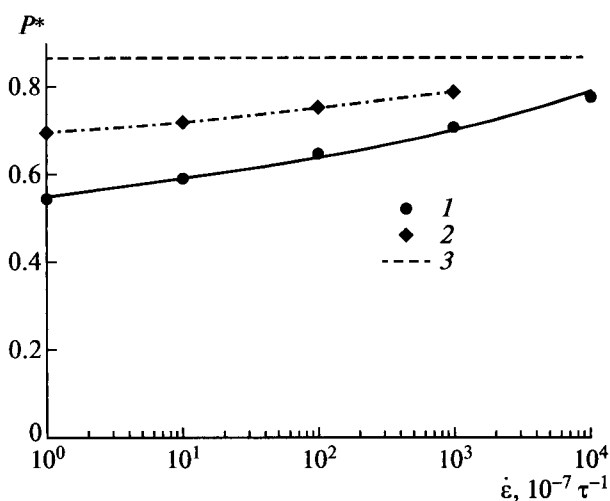


Рис. 7. Зависимость откольной прочности от скорости растяжения: 1 — с учетом роста полостей, 2 — нуклеация без роста полостей, 3 — спинодаль.

Эта функция в случае $t_{sp} \ll a$ (такая ситуация характерна для результатов моделирования) имеет резкий пик при $t_m \approx t_{sp}$. В этом случае можно считать, что все полости, дающие значительный вклад в общий объем полостей к моменту откола, зарождаются в узком интервале времени $(t_m; t_m + \Delta t)$, а затем происходит их рост. Поскольку $\dot{\epsilon}t_{sp} \approx \text{const}$, то $t_{sp}/a \approx \text{const}$, поэтому $t_m/t_{sp} = \alpha \approx \text{const}$ и $\Delta t/t_{sp} = \delta \approx \text{const}$. Тогда получаем общее число полостей

$$N = \dot{n}(t_m)\Delta t = J(t_m)V_0\Delta t = J_0 \exp\left(-\frac{b^2}{P^2(t_m)}\right)V_0\delta t_{sp},$$

и скорость разрушения в момент откола

$$\frac{\dot{V}_{cav}}{V_0} = N4\pi[\mu_0(1 - \alpha)t_{sp}]^2 \mu_0 \propto t_{sp}^3 \exp\left(-\frac{b^2}{P^2(t_m)}\right).$$

В силу критерия откола $\frac{\dot{V}_{cav}}{V_0} = \dot{\epsilon}$ с учетом условия

влия $\dot{\epsilon}t_{sp} \approx \text{const}$ имеем

$$\exp\left(-\frac{b^2}{P^2(t_m)}\right) \propto \dot{\epsilon}^4 \text{ или } \exp\left(-\frac{b^2}{P^2(t_m)}\right) = \left(\frac{\dot{\epsilon}}{B}\right)^4.$$

Отсюда легко видеть, что $P(t_m) = \alpha P_s = \frac{b}{2\sqrt{\ln B/\dot{\epsilon}}}$ (B — некоторая константа), т.е. зависимость $P_s(\dot{\epsilon})$ имеет тот же вид, что и в случае 1.

Столь слабая зависимость откольной прочности от скорости растяжения получается из-за сильной зависимости частоты нуклеации от давления. Увеличение растягивающих напряжений на несколько процентов приводит к возрастанию частоты нуклеации на несколько порядков. Поэтому при увеличении скорости растяжения на порядок максимально достижимое давление меняется лишь на несколько процентов.

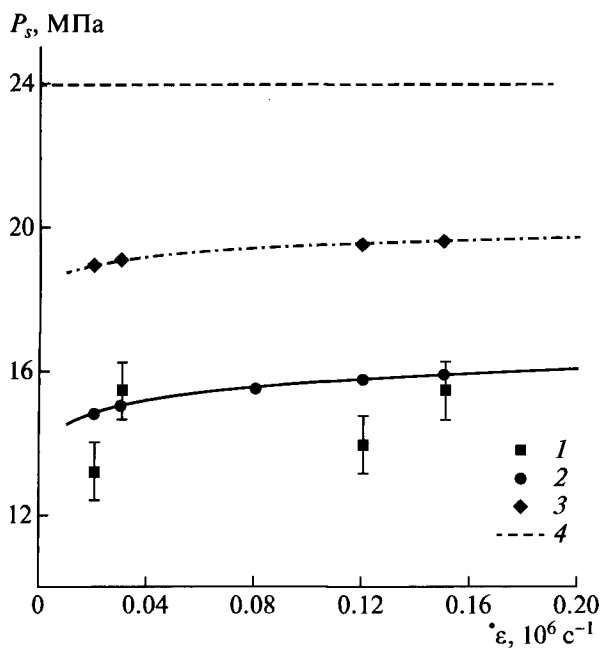


Рис. 8. Зависимость откольной прочности гексана от скорости растяжения: 1 – экспериментальные данные [5], 2 – расчет по модели NAG для 292 К, 3 – расчет по модели без роста полостей, 4 – спинодаль.

Сравнение результатов расчетов при учете вклада роста полостей в увеличение пористости с экспериментальными данными [5] приведено на рис. 8. Предложенная кинетическая модель хорошо описывает экспериментальные данные как по характеру зависимости, так и по абсолютной величине.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе результатов атомистического моделирования процессов гомогенной нуклеации и роста полостей в растянутой жидкости получены кинетические параметры этих процессов. Предложена кинетическая модель разрушения типа “зарождение и рост полостей” и определена откольная прочность жидкости в режиме деформирования с постоянной скоростью. Рассчитанная откольная прочность жидкости слабо зависит от скорости растяжения, что соответствует экспериментальным данным. Показано, что существенный вклад в разрушение при скоростях деформирования, достижимых в ударно-волновых экспериментах, дает рост полостей, и им нельзя пренебрегать при оценках откольной прочности.

Молекулярно-динамические расчеты проводились на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ и МВС-100К (МСЦ РАН). В.В. Писарев благодарит за поддержку Фонд некоммерческих программ «Династия». Работа поддержана Программой фундаментальных исследований

РАН (№ 12) и грантами РФФИ (№ 09-08-01116-а, РФФИ-09-08-12161-офи_м).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Ашитков С.И. и др. О нанотолке после воздействия ультракороткого лазерного импульса // ЖЭТФ. 2008. Т. 134. Вып. 1. С. 5.
2. Ivanov D.S., Zhigilei L.V. Combined Atomistic-Continuum Modeling of Short-Pulse Laser Melting and Disintegration of Metal Films // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 064114.
3. De Ressaugier T., Signor L., Dragon A. et al. Spallation in Laser Shock-Loaded Tin Below and Just Above Melting on Release // J. Appl. Phys. 2007. V. 102. P. 073535.
4. Канель Г.И., Уткин А.В., Разоренов С.В. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996.
5. Уткин А.В., Сосиков В.А., Богач А.А. Импульсное растяжение гексана и глицерина при ударно-волновом воздействии // ПМТФ. 2003. Т. 44. № 2. С. 27.
6. Уткин А.В., Богач А.А. Прочность воды при импульсном растяжении // ПМТФ. 2000. Т. 41. № 4. С. 198.
7. Utkin A.V., Sosikov V.A., Fortov V.E. Tension of Ethyl Alcohol and Hexadecane by Shock Waves. In: Shock Compression of Condensed Matter – 2005 / Ed. by Furnish M.D. et al. N.Y.: American Institute of Physics, 2006. V. 845. P. 896.
8. Виноградов В.Е. Кавитационная прочность жидкостей с большими молекулами. В сб.: Метастабильные состояния и фазовые переходы. Вып. 9. Екатеринбург, 2008. С. 39.
9. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. М.: Наука, 1972.
10. Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. М.: Наука, 1984.
11. Grady D.E. The Spall Strength of Condensed Matter // J. Mech. Phys. Solids. 1988. V. 36. № 3. P. 353.
12. Груздков А.А., Петров Ю.В. Кавитационное разрушение жидкостей с большой и малой вязкостью // ЖТФ. 2008. Т. 78. № 3. С. 6.
13. Povarnitsyn M.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R. Simulation of Shock-Induced Fragmentation and Vaporization in Metals // Int. J. Impact. Eng. 2005. V. 35. № 12. P. 1723.
14. Povarnitsyn M.E., Itina T.E., Sentis M. et al. Material Decomposition Mechanisms in Femtosecond Laser Interactions with Metals // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P. 235414.
15. Insepov Z., Hassanein A., Bazhurov T.T. et al. Molecular Dynamics Simulations of Bubble Formation and Cavitation in Liquid Metals // Fusion Science and Technology. 2007. V. 52. № 4. P. 885.
16. Куksин А.Ю., Янилкин А.В. Кинетическая модель разрушения при высокоскоростном растяжении на примере кристаллического алюминия // Докл. РАН. 2007. Т. 413. № 5. С. 615.

17. *Plimpton S.J.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117. P. 1.
18. *Baidakov V.G., Protsenko S.P.* Singular Point of a System of Lennard-Jones Particles at Negative Pressures // *Phys. Rev. Letters.* 2005. V. 95. P. 015701.
19. *Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Фазовая диаграмма и спиноподобный распад метастабильных состояний леннард-джонсовской системы // *ТВТ.* 2007. Т. 45. № 1. С. 43.
20. *Морозов И.В., Норман Г.Э., Смыслов А.А.* Объемная релаксация в простой жидкости. Молекулярно-динамическое моделирование // *ТВТ.* 2008. Т. 46. № 6. С. 836.
21. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Гомогенная нуклеация в перегретом кристалле. Молекулярно-динамический расчет // *Докл. РАН.* 2002. Т. 386. № 3. С. 328.
22. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастические свойства молекулярно-динамической леннард-джонсовской системы в равновесном и неравновесном состояниях // *ЖЭТФ.* 2001. Т. 119. Вып. 5. С. 1011.
23. *Baidakov V.G., Chernykh G.G., Protsenko S.P.* Effect of the Cut-off Radius of the Intermolecular Potential on Phase Equilibrium and Surface Tension in Lennard-Jones Systems // *Chem. Phys. Lett.* 2000. V. 321. P. 315.
24. *Mecke M., Winkelmann J., Fischer J.* Molecular Dynamics Simulation of the Liquid-Vapor Interface: Lennard-Jones Liquid // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 107. № 21. P. 9264.
25. *Schmelzer J.W.P., Gutzow I., Schmelzer J., Jr.* Curvature-Dependent Surface Tension and Nucleation Theory // *J. Colloid and Interface Sci.* 1996. V. 178. P. 657.
26. *Жуховицкий Д.И.* Поверхностное натяжение границы раздела пар-жидкость с конечной кривизной // *Коллоид. журн.* 2003. Т. 65. С. 480.
27. *Dekel E., Eliezer S., Henis Z. et al.* Spallation Model For the High Strain Rate Range // *J. Appl. Phys.* 1998. V. 84. № 9. P. 4851.
28. *Справочник химика. Т. 1 / Под ред. Никольского Б.П. М.-Л.: Химия, 1966.*