

# Лабораторная работа №3.

## Моделирование растягивающей нагрузки

**Цель работы:** Ознакомление со способом приложения нагрузки в программе LAMMPS.

**Варианты заданий:** ваш порядковый номер в журнале.

Результат представить в отчете. Обязательно наличие программного кода и графиков.

При испытании на растяжение, согласно ГОСТ 1497, определяют сопротивление металла малым пластическим деформациям, характеризующееся пределом пропорциональности  $\sigma_p$ , пределам упругости  $\sigma_y$  и пределом текучести  $\sigma_t$  (или  $\sigma_{0,2}$ ), а также сопротивление значительным пластическим деформациям, которое выражают временным сопротивлением  $\sigma_v$ .

При растяжении определяют и пластичность металла, то есть величину пластической деформации до разрушения, которая может быть оценена относительным удлинением образца  $\delta$  и его относительным сужением  $\psi$  (после разрыва образца).

Диаграмма растяжения показывает зависимость между растягивающей нагрузкой, действующей на образец, и его деформацией. На диаграмме по оси ординат записывают нагрузку  $P$ , а по оси абсцисс - абсолютное удлинение образца  $\Delta l$  ( $\Delta l = l_x - l_0$ , где  $l_x$  и  $l_0$  - текущая (в данный момент времени) и начальная длины образца) — Рис. 1.

Кривая изменения абсолютного удлинения  $\Delta l$  в зависимости от прилагаемой нагрузки при растяжении состоит из прямолинейного участка ОА и криволинейного АВ, отвечающего переходу в область пластических (остаточных) деформаций и характеризуемой постепенным уменьшением тангенса угла наклона кривой к оси абсцисс (см. Рис. 1).

Пластической называют деформацию, остающуюся после снятия нагрузки (кроме того, наблюдается обратимая пластическая деформация, которая, как и упругая, исчезает после снятия нагрузки). Величина оста-

точной деформации в момент разрушения (удлинение, сужение) служит мерой пластичности материала. Если величина пластической деформации до разрушения мала, то материал называют хрупким. Пластическая деформация предшествует любому виду разрушения (вязкому или квазихрупкому), но при квазихрупком разрушении она весьма мала, локализована в микро- и субмикрообъемах и не выявляется при обычных методах измерения макродеформации. В этом последнем случае необходимо изыскание таких условий испытания (скорости нагружения, температуры испытания и т. п.), при которых можно было бы выявить пластичность материала.

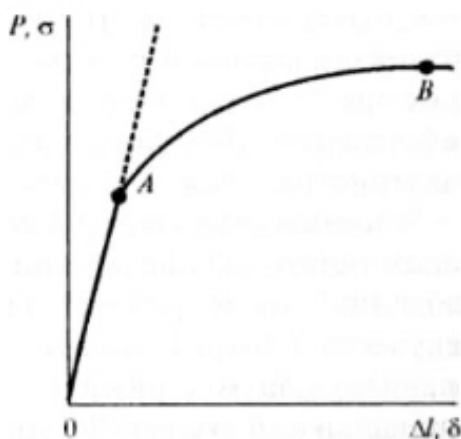


Рис. 1: Схема диаграммы растяжения: изменение удлинения образца в зависимости от нагрузки.

Напряжения ниже точки A практически не вызывают измеримой остаточной деформации и относительно этой точки могут быть установлены (с определенным допуском на точность измеряемых деформаций) предел упругости  $\sigma_y$ , а также предел пропорциональности  $\sigma_p$ . Здесь и далее напряжения получают делением соответствующей нагрузки на  $F_0$  — площадь поперечного сечения образца до испытания.

Предел упругости  $\sigma_y$  — условное напряжение, соответствующее появлению остаточных деформаций определенной заданной величины (0,05; 0,001; 0,003; 0,005%); допуск на остаточную деформацию указывается в индексе при  $\sigma_y$ .

Предел пропорциональности  $\sigma_p$  — условное напряжение, соответствующее отклонениям от линейного хода кривой деформации (от закона Гука), задаваемым определенным допуском (например, увеличением тангенса угла наклона кривой деформации к оси напряжения на 25 или 50% при переходе от прямолинейного участка к криволинейному).

Следует отметить, что для реальных поликристаллических металлов определение  $\sigma_y$  и  $\sigma_p$  представляет значительные методические трудности, так как предусматривает измерение очень малых деформаций. Поэтому на практике чаще обращаются к такой характеристике, как условный предел текучести.

Условный предел текучести — это условное напряжение, при котором остаточная деформация достигает определенной величины (обычно 0,2% от рабочей длины образца; тогда условный предел текучести обозначают как  $\sigma_{0,2}$ ). Величину  $\sigma_{0,2}$  определяют, правило, для материалов, у которых на диаграмме отсутствует площадка или зуб текучести.

Помимо экспериментальных исследований могут проводиться и теоретические расчеты, посвященные изучению механизмов деформирования, протеканию процесса деформирования и др. в разных металлах, сплавах. В рамках данной лабораторной проводится моделирование растяжения образцов никеля и железа.

### Задание 1. Создание структуры ГЦК Ni и ОЦК Fe.

1. Создать две папки для двух кристаллов - ГЦК Ni и ОЦК Fe, назвать папки `FCC_Ni` и `BCC_Fe`. 2. В каждую папку положить нужные файлы: `lmp_serial`, соответствующий файл потенциала, создать файлы с текстом программы.

Текст программы для создания ОЦК железа (синие строки - текст программы, черные - комментарии):

```

----- Инициализация системы -----
units metal
boundary p p p
atom_style atomic
----- Создадим структуру -----
- зададим параметр решетки и тип решетки;
- определим направления вдоль которых будет создаваться решетка
x=[100], y=[010], z=[001] и начало координат.
lattice bcc 2.8665 orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1 origin 0.1 0.1
0.1
region box block 0 10 0 10 0 10 0 10 - зададим размер ячейки вдоль x, y, z
create_box 1 box - создадим ячейку моделирования
create_atoms 1 box - создадим атомы
- ----- Зададим потенциал -----
pair_style eam/fs
pair_coeff * * Fe_mm.eam.fs Fe
neighbor 0.3 bin
neigh_modify delay 5
----- Рассчитаем следующие величины -----
compute eng all pe/atom - потенциальна энергия на атом
compute eatoms all reduce sum c_eng - полная энергия системы
----- Run Minimization -----
reset_timestep 0

```

Таблица 1: Варианты к заданию 1.

| Вариант | Размер |
|---------|--------|
| 1       | 11     |
| 2       | 12     |
| 3       | 13     |
| 4       | 9      |
| 5       | 14     |
| 6       | 12     |
| 7       | 10     |
| 8       | 8      |
| 9       | 9      |
| 10      | 9      |
| 11      | 10     |
| 12      | 11     |
| 13      | 15     |
| 14      | 13     |
| 15      | 14     |
| 16      | 8      |

```

dump 1 all atom 50 dump_FeBCC.atom - запишем структуру
thermo 10
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
dump GA10K all custom 100 FeBCC.lammpstrj id type x y z
min_style cg - тип минимизации
minimize 1e-25 1e-25 5000 10000 - релаксация
write_restart BCC_Fe.restart -

```

С подобной программой вы познакомились на первой лабораторной. Данная модификация позволяет создать кристалл ОЦК железа и отрелаксировать структуру. Причем кристалл железа будет ориентирован в пространстве следующим образом:  $\vec{x}=[100]$ ,  $\vec{y}=[010]$ ,  $\vec{z}=[001]$ . Размер кристалла составит  $L_x=10 \cdot a_0$ ,  $L_y=10 \cdot a_0$ ,  $L_z=10 \cdot a_0$ , где  $a_0$  - параметр решетки Fe.

Аналогично создадим кристалл ГЦК никеля  $\vec{x}=[100]$ ,  $\vec{y}=[010]$ ,  $\vec{z}=[001]$  размером  $L_x=10 \cdot a_0$ ,  $L_y=10 \cdot a_0$ ,  $L_z=10 \cdot a_0$ , где  $a_0$  - параметр решетки Ni, изменив необходимые команды.

Задайте размер кристалла в соответствии со своим вариантом.

**Внимание!** В отчете представить текст программы для одного из кристаллов!

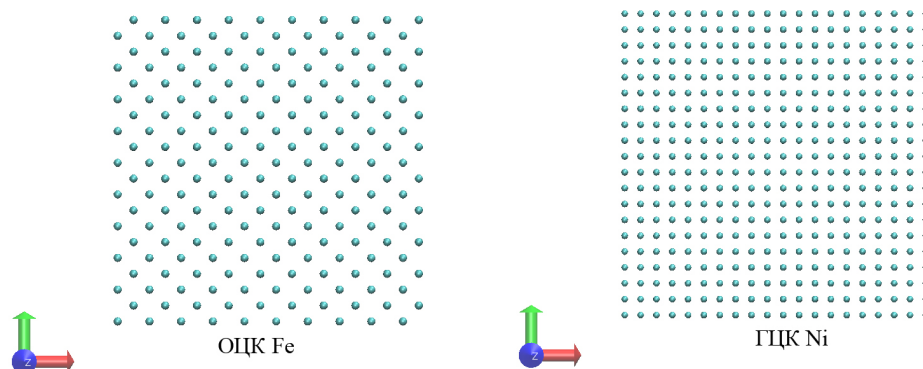


Рис. 2: Структуры после релаксации.

Запустите программы на счет. Постройте структуры Ni и Fe после релаксации, изображение представьте в отчете. Пример показан на рис. 2.

**Задание 2.** Растяжение кристаллов Fe и Ni.

Создайте две папки - `tensile_Ni` и `tensile_Fe`. В папки положите файлы соответствующих потенциалов, `lmp_serial` и создайте файл `in.tensile`, в который запишите следующие команды:

```

————— Инициализация системы —————
units metal
boundary p p p
atom_style atomic
read_restart [название вашего файла]
pair_style eam/fs
pair_coeff * * [название вашего потенциала]
neighbor 0.3 bin
neigh_modify delay 5
————— Приведем систему в равновесие при  $T=300$  K —————
reset_timestep 0
timestep 0.001
velocity all create 300 765896 mom yes rot no
fix 1 all npt temp 300 300 1 iso 0 0 1 drag 1
run 20000
unfix 1
————— Введем переменные ————— variable tmp equal "lx"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0} "
————— Приложим растяжение —————

```

```

reset_timestep 0
fix 1 all npt temp 300 300 1 y 0 0 1 z 0 0 1 drag 1
variable srate equal 1.0e10
variable srate1 equal "v_srate/1.0e12"
fix 2 all deform 1 x erate ${srate1} units box remap x
variable strain equal "(lx - v_L0)/v_L0"
variable p1 equal "v_strain"
variable p2 equal "-pxx/10000"
variable p3 equal "-pyy/10000"
variable p4 equal "-pzz/10000"
fix defl all print 100 "${p1} ${p2} ${p3} ${p4}" file Ni.defl.txt screen no
dump 1 all custom 250 dump.tensile.atom id type xs ys zs fx fy fz
thermo 1000
thermo_style custom step v_strain temp v_p2 v_p3 v_p4 ke pe press
dump GA10K all custom 100 Ni_tensile.lammpstrj id type x y z
run 20000
print "All done"

```

Детально разберем программу. В первом блоке "Инициализация системы" команды вам уже знакомы. Мы задаем начальные и граничные условия, определяем потенциал. Соответственно для разных металлов задаем разные потенциалы и считываем разные отрелаксированные файлы. Во втором блоке "Приведем систему в равновесие при  $T=300$  К как очевидно из названия, мы приводим нашу систему в равновесие, выдерживаем (термализуем) ее при 300 К: задаем шаг по времени (**timestep**), задаем начальные скорости атомов (**velocity all create**) и, следовательно, температуру, и выдерживаем в течении 10000 шагов (**run**). В блоке "Введем переменные" командой **variable** определим нужные переменные (**tmp**, **L0**) и выведем их на экран командой **print**. Как очевидно из текста программы **L0** - начальная длина образца, равная величине **lx** - системной переменной, определяющей размер ячейки моделирования. Эта величина нужна будет далее.

Блок "Приложим растяжение":

**fix 1** устанавливает температуру при которой будет происходить растяжение;

командой **variable** задаем необходимые переменные: **srate**, **srate1** - скорость деформации;

**fix 2** командой **x erate** задает деформацию вдоль оси x со скоростью **srate1**;

командой **variable** задаем и считаем переменные **strain**, **p1** (величина деформации), **p2**, **p3**, **p4** - величина трех компонент напряжения, причем,

программа производит расчет в барах, но в файл выводим величину в ГПа, для чего осуществляем деление на 10000.

`fix 3` создает текстовый файл с результатом  
`dump1` записывает результирующий файл.

Кроме того записываются файл `.log` и расчет производится в течении 20000 шагов.

Приложенное напряжение задается в строке `variable srate equal 1.0e10` величиной `1.0e10`. На рис. 3 показана зависимость напряжения от деформации для трех значений параметра `srate`. В первом случае напряжения достаточно высоки, чтобы вызвать разрушение структуры, однако хорошо видно и кривую в процессе растяжения. Такая кривая выглядит вполне характерно. Во втором случае параметр скорости деформирования слишком большой, что приводит к быстрому разрушению. Такая кривая не может рассматриваться как нормальный результат, единственный участок где можно говорить о нормальном протекании растяжения это до деформации 0.1. В последнем случае скорость деформации слишком маленькая и растяжение в течении 20000 шагов приводит лишь к небольшому деформированию на 2%, причем в линейной области. В данной работе было выбрано значение `1.0e10`, поскольку позволяет рассмотреть весь процесс деформирования вплоть до разрушения, но является достаточно малой скоростью, чтобы не привести к коллапсу системы, как на среднем рис. 3.

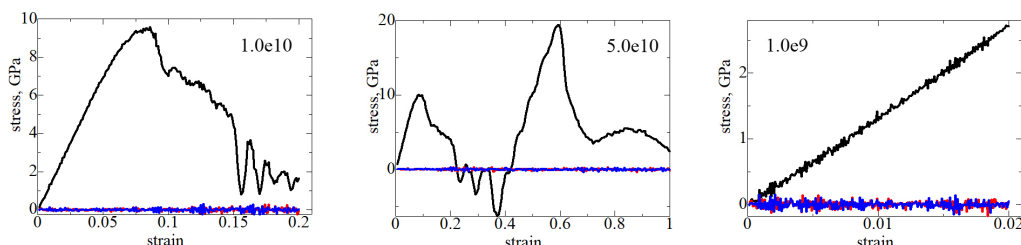


Рис. 3: Пример кривых напряжение-деформация для трех скоростей деформирования.

Обратите внимание, что файл считывает структуру после релаксации, следовательно в папку также необходимо добавить файл `.restart`. Прodelайте эксперимент по растяжению для железа и никеля. Содержимое папки `TensileFe` в качестве примера показано на рис. 4.

**Задание 3.** Обработка результатов моделирования растяжения.

| Имя            | Дата изменения   | Тип            | Размер    |
|----------------|------------------|----------------|-----------|
| Fe_BCC.restart | 25.03.2019 12:48 | Файл "RESTART" | 173 КБ    |
| Fe_mm.eam.fs   | 12.12.2018 2:51  | Файл "FS"      | 745 КБ    |
| in.tensile     | 25.03.2019 12:43 | Файл "TENSILE" | 4 КБ      |
| Imp_serial.exe | 02.09.2016 3:41  | Приложение     | 44 512 КБ |

Рис. 4: Содержимое папки [TensileFe](#) перед запуском программы.

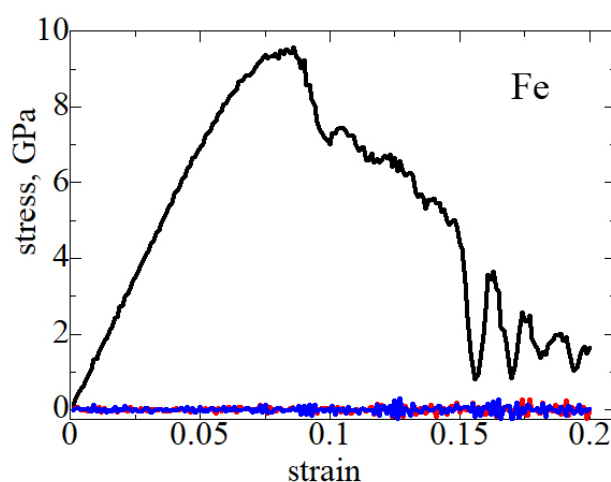


Рис. 5: Кривая зависимости напряжение-деформация для железа.

Используя информацию из файла [Ni.defl.txt/Fe.defl.txt](#), который записывался в процессе счета постройте кривые напряжение-деформация (пример для Fe показан на рис. 5). Кроме того необходимо построить промежуточную ( $t_1$ ) и итоговую ( $t_2$ ) структуру и установить происходили ли какие-либо структурные изменения, которые затем описать в выводах. Моменты времени  $t_1$  и  $t_2$  выбрать исходя из происходящих изменений. Например, согласно кривой нагружения критическое значение деформации  $\sim 0.085-0.09$ , следовательно этот момент следует выбрать для изображения структуры. При больших деформациях система переходит в другую стадию деформации, приближаясь к моменту разрушения. Пример показан на рис. 6.

**Задание 4.** Сделайте вывод о проделанной работе.

**Пример вывода к результатам, представленным в примере:**

В работе было проведено молекулярно-динамическое моделирование

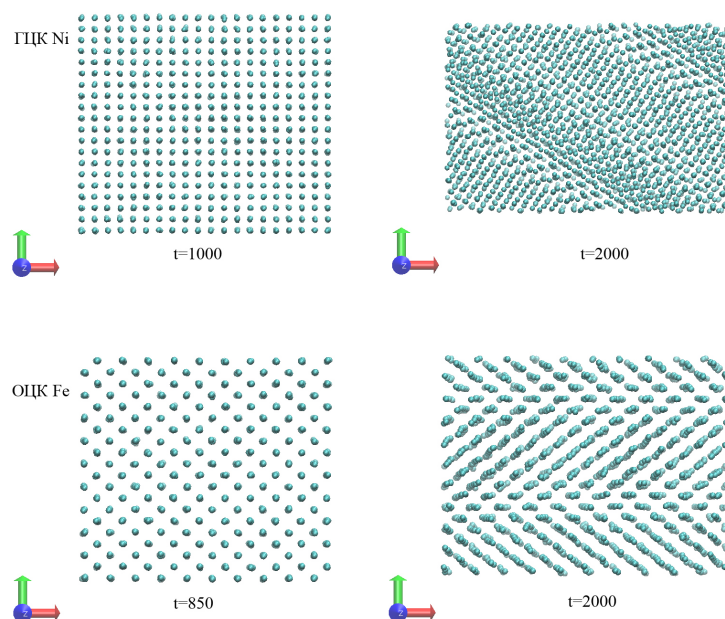


Рис. 6: Промежуточная ( $t_1$ ) и итоговая ( $t_2$ ) структура для двух кристаллов - Ni и Fe.

растяжения двух образцов - ОЦК железа и ГЦК никеля. Из рисунка отрелаксированной начальной структуры можно заключить, что два кристалла с разной решеткой сильно отличаются по своему строению. Как видно из кривой нагрузка-деформация, заданная скорость деформации слишком высока и приводит к большим деформациям и разрушению материала. Из сравнения кривой нагрузка-деформация и визуализации структуры видно, что структура нормально деформируется вплоть до деформации 0.085 для железа и 0.1 для никеля, то есть при одних и тех же условиях никель выдерживает большую деформацию. Далее начинается процесс пластического течения, что также очевидно из визуализации структуры.

### Контрольные вопросы

1. Что определяют при растяжении?
2. Что показывает диаграмма растяжения?
3. Какие участки можно выделить на кривой нагрузка-деформация?
4. Какую деформацию называют пластической? Какую называют упругой?
5. Что такое предел упругости?
6. Как скорость растяжения влияет на результат при атомистическом моделировании?