

Министерство науки и высшего образования российской Федерации
Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)
Новосибирский государственный университет
Сибирское отделение Российской академии наук
Институт теоретической и прикладной механики им. С.А Христиановича
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики"

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА – 2025

25 июня – 2 июля 2025 г.

Новосибирск, Россия

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Под редакцией профессора В.Я. Рудяка

Новосибирск, 2025

УДК 519:531:532:533:536:538:539:544:577

М75

Молекулярная динамика – 2025. Тезисы докладов Всероссийской конференции / под редакцией
М75 профессора В.Я. Рудяка. – Новосибирск : Издательство «Сибпринт», 2025. – 124 с.
ISBN 978-5-98297-068-8

Сборник содержит доклады Всероссийской конференции "Молекулярная Динамика – 2025", которая проводилась 25 июня – 2 июля 2025 года в Новосибирске. В сборнике представлены доклады по направлениям:

- Новые подходы и алгоритмы атомного и молекулярного моделирования.
- Квантовое атомистическое моделирование.
- Технологии суперкомпьютерного моделирования.
- Молекулярно-динамическое моделирование физических, химических и биологических систем и процессов.
- Молекулярные методы моделирования современных материалов.
- Молекулярно-динамическое моделирование течений в микро- и наносистемах, включая пористые среды.
- Молекулярно-динамическое моделирование процессов в открытых системах.
- Многомасштабные технологии атомистического моделирования.
- Технологии атомистического машинного обучения.

Издание предназначено для специалистов, аспирантов и студентов, специализирующихся в области физики, механики, биофизики и математического моделирования

Сборник подготовлен при частичной финансовой поддержке Новосибирского государственного архитектурно-строительного университета (Сибстрин)

УДК 519:531:532:533:536:538:539:544:577

ISBN 978-5-98297-068-8

© Новосибирский государственный
архитектурно-строительный
университет (Сибстрин)

УДК 539.3

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ С ПРЕГРАДОЙ

Уткин А.В.^{1,2}, Фомин В.М.^{1,2}¹ Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
630090, Россия, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1² Новосибирский государственный технический университет,
630073, Россия, Новосибирск, проспект Карла Маркса, 20

utkin@itam.nsc.ru

Несмотря на многолетний интерес к высокоскоростному ударному взаимодействию, существующие численные модели позволяют моделировать явления лишь в достаточно простых средах. Это связано, в первую очередь, со сложностью описания экстремальных деформаций, сопровождающихся разрушением и плавлением, а также необходимостью создания уравнения состояния способного описать поведение материала при ударе [1–3].

Одним из возможных подходов является анализ методами теории подобия и размерности с последующими уточнениями на основе новых экспериментальных данных или данных численного моделирования [4]. В результате такого подхода и анализа экспериментальных данных по высокоскоростному ударному взаимодействию компактного металлического ударника с металлической преградой был сформулирован так называемый энергетический критерий: объем кратера остается пропорциональным кинетической энергии ударника и обратно пропорциональным прочности материала преграды [5, 6].

Наибольшие вопросы вызывает выбор параметра прочности или динамической твердости преграды. Обычно динамическую твердость определяют на основе статической твердости или статического предела текучести материала преграды вводя специальные поправочные коэффициенты динамичности. Но оценка динамической твердости материала на основе данных статических экспериментов вносит серьезную погрешность даже для случая одинакового материала ударника и преграды. В связи с этим в математических моделях, описывающих поведение материала необходимо учитывать зависимость динамической твердости от скорости нагружения. Эта задача может быть решена в рамках метода молекулярной динамики на основе задачи о соударении нанокластера с преградой.

В численном эксперименте сферические нанокластеры титана под углом 90 градусов ударялись о титановую преграду со скоростями от 0.8 км/с до 12 км/с. Размер преграды 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 преграды действовала искусственная вязкость, что позволило полностью поглотить ударные волны, инициируемые ударом кластера о преграду.

Для моделирования межатомного взаимодействия в рассматриваемых металлах был использован метод

внедренного атома [7]. Интегрирование уравнения движения проводилось с использованием скоростной модификации схемы Верле. Для численного моделирования был использован разработанный авторами параллельный код, использующий графические процессоры общего назначения, поддерживающие технологию CUDA [8].

В результате удара кластера в преграде образовывался кратер. Используя энергетическое определение динамической твердости, предложенное Тейбором (отношение кинетической энергии ударника к объему образовавшегося кратера), и основываясь на точных измерениях объема кратера в численных экспериментах, были найдены зависимости динамической твердости от скорости удара для различных размеров нанокластера [9, 10]. Было показано, что при увеличении размера нанокластера динамическая твердость уменьшается и стремится к постоянному значению для выбранной величины скорости удара. При увеличении скорости удара, зависимости динамической твердости стремятся к постоянным асимптотическим значениям.

Список литературы

1. Златин Н.А., Красильщиков А.П., Мишин Г.И. Баллистические установки и их применение в экспериментальных исследованиях. Москва: Наука. 1974.
2. Краус Е.И., Фомин В.М., Шабалин И.И. Построение единой кривой моделирования процесса кратерообразования компактными ударниками различной формы // Прикладная механика и техническая физика. 2020. Т. 61. С. 199–210.
3. Альтшулер Л.В., Трунин Р.Ф., Урлин В.Д., Фортков В.Е., Фунтиков А.И. Развитие в России динамических методов исследований высоких давлений // УФН. 1999. Т. 169. Р. 323–344.
4. Holsapple K.A. The scaling of impact phenomena // Int. J. Impact Engineering. 1987. Vol. 5. P. 343–355.
5. Herrmann W., Wilbeck J.S. Review of hypervelocity penetration theories // Int. J. Impact Engineering. 1987. Vol. 5. P. 307.
6. Shanbing Yu., Gengchen S., Qingming T. Experimental laws of cratering for hypervelocity impacts of spherical projectiles into thick target // Int. J. Impact Engineering. 1994. Vol. 15. P. 67–77.
7. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. Phys. Rev. B 29. 6443. 1984.
8. 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. Vol. 2288. P. 030083(12).
9. Tabor D. The Hardness of Metals. Oxford. 1951.
10. Y. Tirupataiah, G. Sundararajan A dynamic indentation technique for the characterization of the high strain rate plastic flow behavior of ductile metals and alloys // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1991. Vol. 39. P. 243–271.