

# МОДЕЛЬ РАЗРУШЕНИЯ РАСПЛАВОВ МЕТАЛЛОВ И ПРОЧНОСТЬ РАСПЛАВОВ В ДИНАМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

*П. Н. Майер\**, *А. Е. Майер\*\**

*Челябинский государственный университет  
454001, Челябинск, Россия*

Поступила в редакцию 7 ноября 2014 г.

Разработка континуальной модели деформации и разрушения расплавов необходима для описания поведения металлов в экстремальных состояниях, в частности, при сильноточном электронном и ультракоротком лазерном облучении. Представленная модель включает уравнения механики двухфазной сплошной среды, уравнения кинетики фазовых переходов. Описаны изменение объема дисперсной и несущей фаз, изменение количества дисперсных частиц, учтен обмен массой и энергией между фазами за счет фазовых переходов. Проведены молекулярно-динамические расчеты с использованием программы LAMMPS. Континуальная модель верифицирована по молекулярно-динамическим, расчетным и экспериментальным данным. Определена прочность алюминия, меди и никеля при различных температурах и скоростях деформации. Показано, что увеличение скорости деформации приводит к увеличению прочности жидкого металла, а увеличение температуры — к ее понижению.

DOI: 10.7868/S0044451015070044

## 1. ВВЕДЕНИЕ

При интенсивном лазерном облучении [1–8], облучении потоками заряженных частиц, в том числе электронов [9–13], взрывном воздействии [14–16], включая электровзрыв проводников [17, 18], происходит быстрое энерговыделение в металле, что приводит к нагреву, плавлению, распространению ударных волн и деформации. В облучаемом металле наблюдаются структурные изменения, фазовые переходы и разрушение (фрагментация) [13]. Наряду с поверхностным испарением и разрушением, что имеет место при лазерном облучении и некоторых режимах электронного облучения [19], в металле может реализовываться также объемное кипение. Объемное кипение может возникать не только вследствие теплового расширения (как в случае фемтосекундного лазерного [20, 21] или сильноточного электронного [9] облучения), но и под действием растягивающих напряжений в расплаве, возникающих при отражении ударных волн от его свободной поверхности [22, 23].

Динамическое разрушение жидкости в основном

исследуется теоретическими и численными методами [24, 25]. Количество экспериментальных работ в области разрушения расплавов [20–23] существенно ограничивается сложностью фиксации параметров вещества, находящегося в экстремальном состоянии. Широко применяется молекулярно-динамическое моделирование [26–29], позволяющее исследовать структурные изменения на атомном уровне, а также получать параметры материала (коэффициенты вязкости и поверхностного натяжения), которые далее используются в континуальном моделировании. В отличие от молекулярно-динамических расчетов, континуальное моделирование позволяет исследовать динамику расплава произвольного размера на достаточно больших временных интервалах.

В случае электронного облучения из-за резкого импульсного нагрева создается область повышенного давления с характерной толщиной от сотых долей миллиметра до нескольких миллиметров (последнее значение для энергий электронов порядка 1 МэВ [9]). При ее разгрузке происходит тепловое расширение расплава сначала под действием давления, а затем по инерции. В результате появляется область растягивающих напряжений, в которой расплав переходит в метастабильное состояние, разрушаемое посредством кавитации, т. е. путем образования и роста полостей, заполненных парами метал-

\*E-mail: polina.nik@mail.ru

\*\*E-mail: mayer@csu.ru

ла. Далее вещество переходит в двухфазное состояние. Объединение пор вызывает разрыв расплава и фрагментацию его на капли. Описание данного процесса методами молекулярной динамики затруднительно вследствие относительно больших пространственных и временных масштабов задачи. Эффективным здесь может быть континуальное моделирование, которое требует применения моделей многофазных сред [30] и использования широкодиапазонных уравнений состояния, описывающих метастабильную область и фазовые переходы.

Ближкие явления и процессы наблюдаются при ультракоротком лазерном облучении [13, 14]. Здесь также имеет место изохорный нагрев, но энерговыделение затрагивает более узкий поверхностный слой толщиной в десятки нанометров [31]. Происходит плавление и динамическое разрушение расплавленного поверхностного слоя. К настоящему времени накоплен существенный объем экспериментальных и теоретических результатов по исследованию взаимодействия лазерного излучения с веществом [1–8, 21, 31], эти данные могут применяться при построении и тестировании модели разрушения металлов в жидкой фазе.

Актуальным является исследование динамики металла в широком диапазоне состояний, определение прочности расплава [20, 21], исследование распределения по размерам фрагментов расплава после разрушения. Результаты соответствующих исследований могут применяться в различных технических приложениях: нанесение покрытий, формирование пористой структуры в металле, оптимизация методов получения ультрадисперсных частиц металла при интенсивном облучении и т. д.

## 2. КONTИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ РАЗРУШЕНИЯ РАСПЛАВА

Выделим стадии эволюции расплава в условиях интенсивной деформации:

- а) конденсированный жидкий металл;
- б) жидкий металл с пузырьками пара;
- в) пар металла с каплями жидкой фазы.

Переход от стадии а) к стадии б) связан с термофлуктуационным образованием в метастабильной жидкой фазе зародышевых пузырьков (кавитацией) [24, 26, 27]. На этапе б) вещество представляет собой пузырьковую жидкость [32]. Переход от стадии б) к стадии в) обусловлен разрывом (фрагментацией) односвязной жидкой фазы на отделенные друг от друга области, которые под действием поверхностно-

го натяжения превращаются в сферические капли, а пар заполняет при этом односвязную область. Динамика вещества описывается уравнениями механики двухфазной гетерогенной сплошной среды [30]. Используются континуальное приближение или приближение взаимопроникающих континуумов: в каждой точке пространства обе фазы описываются непрерывными полями переменных, таких как концентрации и радиусы пузырьков или капель, давления, температуры, плотности, скорости и объемные доли жидкой и паровой фаз. Жидкость является односвязной несущей фазой на стадиях а) и б). Пар является односвязной несущей фазой на стадии в). Пузырьки пара и жидкие капли представляют собой многосвязную дисперсную фазу соответственно на стадиях б) и в).

Из-за малой массы пара в пузырьке и сравнительно большой вязкости жидкости пузырьки с хорошей точностью можно считать «вмороженными» в жидкость. На этапе в) характерное время выравнивания скоростей сферических капель и окружающего пара за счет действия силы Стокса равно

$$\tau_v \approx m/6\pi\eta R \approx 0.2(\rho_l/\eta)R^2, \quad (1)$$

где  $m$  — масса одной капли,  $R$  — ее радиус,  $\rho_l$  — плотность жидкого металла,  $\eta$  — вязкость окружающего пара. Подставляя значения

$$\eta \approx 10^{-4} \text{ Па} \cdot \text{с}, \quad \rho_l \approx 5 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3 \quad (2)$$

и характерный размер капель  $R \approx 10^{-8}$  м, для случая ультракороткого лазерного облучения получаем  $\tau_v \approx 1$  пс, что сопоставимо с характерным временем разлета разрушенного (аблированного) слоя [21, 31]. Для сильноточного электронного облучения  $R \approx 10^{-6}$  м, в этом случае получаем  $\tau_v \approx 10$  мкс, что больше характерного времени разлета, составляющего единицы микросекунд. Но расчеты показывают, что на момент разрыва жидкой фазы давление пара составляет величину порядка  $10^5$  Па, на четыре порядка меньшую величины давления, характерного для этапов а) и б) (порядка  $10^9$  Па). Поэтому на стадии в) разлет капель и пара происходит по инерции, а градиент давления и различие плотностей жидкой и паровой фаз играют малую роль. Используются односкоростное приближение, скорости обеих фаз считаются одинаковыми.

### 2.1. Законы сохранения

На стадии, когда металл расплавился и утратил упругопластические свойства, напряжения будут иметь только шаровую часть — давление. В

односкоростном приближении уравнения механики смеси в целом могут быть записаны аналогично случаю однофазной среды. Используем лагранжевы производные по времени

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = - \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k}, \quad (3)$$

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = - \frac{\partial P_c}{\partial x_i}, \quad (4)$$

$$\rho \frac{dU}{dt} = -P_c \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \rho D + \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \kappa \frac{\partial T_c}{\partial x_k} \right), \quad (5)$$

где  $N$  — размерность задачи, индекс « $i$ » нумерует пространственные компоненты и принимает значения от 1 до  $N$ ,  $v_i$  — скорость вещества,  $P_c$  — давление несущей фазы,  $T_c$  — температура несущей фазы,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности,  $D$  — функция энерговыделения, описывающая количество энергии, переданной единице массы облучаемого вещества за единицу времени. Выражение (3) представляет собой закон сохранения массы, выражение (4) — закон сохранения импульса, (5) — закон сохранения энергии. Индекс « $c$ » обозначает несущую фазу, а индекс « $d$ » — дисперсную фазу.

Средняя плотность вещества вычисляется следующим образом:  $\rho = \rho_c \alpha_c + \rho_d \alpha_d$ , где  $\alpha_c$  и  $\alpha_d$  — объемные доли соответствующих фаз,  $\rho_c$  и  $\rho_d$  — их истинные плотности. Входящее в уравнение (3) среднее значение удельной внутренней энергии смеси выражается как  $U = (U_c \alpha_c \rho_c + U_d \alpha_d \rho_d) / \rho$ , где  $U_c$  и  $U_d$  — удельные внутренние энергии соответственно несущей и дисперсной фаз.

Уравнение (4) определяет скорость вещества, которая одинакова для обеих фаз аналогично [32]. В отличие от используемой в [32] обобщенно-равновесной модели, здесь мы не можем полагать равенство давлений между фазами.

Предположим, что объем дисперсной фазы (пузырьков или капель) остается постоянным при движении вещества в целом и меняется только в результате взаимодействия между фазами, это взаимодействие приводит к росту или уменьшению размеров пузырьков или капель.

Рассмотрим физически бесконечно малый элемент объема смеси  $V$ ,

$$V = V_c + V_d, \quad (6)$$

где  $V_c$  и  $V_d$  — объемы соответственно несущей и дисперсной фаз, заключенные внутри рассматриваемого элемента  $V$ . Изменение объема дисперсной фазы есть

$$\frac{dV_d}{dt} = wV, \quad (7)$$

где  $w$  — скорость увеличения объема дисперсной фазы в единице объема смеси. Продифференцируем выражение (6) по времени:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{dV_c}{dt} + \frac{dV_d}{dt}. \quad (8)$$

В соответствии с (3) можно записать

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k}. \quad (9)$$

Учитывая выражения (7), (8) и (9), получаем скорость изменения объема несущей фазы:

$$\frac{dV_c}{dt} = V \left( \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k} - w \right). \quad (10)$$

Скорость изменения объемной доли несущей фазы выражается как

$$\frac{d\alpha_c}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{V_c}{V} = - \frac{V_c}{V^2} \frac{dV}{dt} + \frac{1}{V} \frac{dV_c}{dt}.$$

Используя выражения (9), (10) и учитывая, что  $\alpha_c + \alpha_d = 1$ , получаем

$$\frac{d\alpha_c}{dt} = \alpha_d \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k} - w. \quad (11)$$

Поскольку  $d\alpha_d/dt = -d\alpha_c/dt$ , из (11) получаем выражение для скорости изменения объемной доли дисперсной фазы,

$$\frac{d\alpha_d}{dt} = -\alpha_d \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + w. \quad (12)$$

Обозначим скорость роста массы дисперсной фазы в единице объема смеси через  $J$ , тогда изменение массы дисперсной фазы определяется как

$$\frac{dm_d}{dt} = JV. \quad (13)$$

Плотность дисперсной фазы равна  $\rho_d = m_d/V_d$ , а скорость ее изменения

$$\frac{d\rho_d}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{m_d}{V_d} \right) = \frac{1}{V_d} \frac{dm_d}{dt} - \frac{m_d}{V_d^2} \frac{dV_d}{dt}.$$

Учитывая выражения (7) и (13), получаем

$$\frac{d\rho_d}{dt} = \frac{V}{V_d} J - \frac{\rho_d w V}{V_d},$$

а выделяя объемные доли дисперсной фазы, преобразуем уравнение для плотности дисперсной фазы к следующему виду:

$$\frac{d\rho_d}{dt} = - \frac{\rho_d}{\alpha_d} w + \frac{J}{\alpha_d}. \quad (14)$$

Полная масса элемента объема смеси  $m = m_d + m_c$  остается постоянной, другими словами, выполняется равенство  $dm/dt = 0$ . Отсюда записываем

$$\frac{dm_c}{dt} = -\frac{dm_d}{dt} = -JV. \quad (15)$$

Скорость изменения плотности несущей фазы равна

$$\frac{d\rho_c}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{m_c}{V_c} \right) = \frac{1}{V_c} \frac{dm_c}{dt} - \frac{m_c}{V_c^2} \frac{dV_c}{dt}.$$

Учитывая выражения (10) и (15), получаем

$$\frac{d\rho_c}{dt} = -J \frac{V}{V_c} - \rho_c \frac{V}{V_c} \left( \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k} - w \right),$$

или, выделяя объемные доли несущей фазы, записываем

$$\frac{d\rho_c}{dt} = \frac{\rho_c}{\alpha_c} \left( -\sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + w \right) - \frac{J}{\alpha_c}. \quad (16)$$

Уравнение баланса энергии для дисперсной фазы имеет вид

$$\frac{d(m_d U_d)}{dt} = -P_c w V + QV + m_d D + JV U_{tr}, \quad (17)$$

где  $m_d U_d$  — внутренняя энергия дисперсной фазы в элементе смеси,  $Q$  — скорость теплообмена между фазами в единице объема смеси,  $U_{tr}$  — удельная внутренняя энергия той фазы, масса которой увеличивается при фазовом переходе:

$$U_{tr} = \begin{cases} U_d, & J > 0, \\ U_c, & J < 0. \end{cases} \quad (18)$$

Первое слагаемое в правой части выражения (17) характеризует мощность работы по расширению, второе слагаемое — скорость теплообмена, третье слагаемое характеризует нагрев от энерговыделения, последнее слагаемое учитывает энергию, передаваемую при фазовом переходе (например, охлаждение жидкости при испарении). Производная по времени от произведения  $m_d U_d$  расписывается как

$$\frac{d(m_d U_d)}{dt} = m_d \frac{dU_d}{dt} + U_d \frac{dm_d}{dt} = m_d \frac{dU_d}{dt} + U_d JV.$$

Поделив выражение (17) на объем  $V$  и учитывая, что  $m_d = \rho_d \alpha_d V$ , получаем

$$\alpha_d \rho_d \frac{dU_d}{dt} = -P_c w + Q + \rho_d \alpha_d D + J(U_{tr} - U_d). \quad (19)$$

Для несущей фазы записываем выражение, аналогичное (17),

$$\frac{d(m_c U_c)}{dt} = -P_c \frac{dV_c}{dt} + QV + m_c D - JV U_{tr} + V \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \kappa \frac{\partial T_c}{\partial x_k} \right), \quad (20)$$

где последнее слагаемое в правой части учитывает теплопроводность, которая имеет место только в односвязной несущей фазе. В формуле (20)  $\kappa = \kappa_c \alpha_c$  — коэффициент теплопроводности смеси,  $\kappa_c$  — теплопроводность вещества несущей фазы. Такая запись предполагает, что дисперсная фаза распределена изотропно. Тогда средняя доля площади сечения, приходящаяся на непрерывную фазу, будет равна ее объемной доле, а средний поток тепла равен истинному потоку, умноженному на  $\alpha_c$ . Учитывая равенства  $dm_c/dt = -J$ ,  $m_c = \rho_c \alpha_c V$  и соотношение (10), получаем для несущей фазы

$$\alpha_c \rho_c \frac{dU_c}{dt} = -P_c \left( \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k} - w \right) - Q + \rho_c \alpha_c D - J(U_{tr} - U_c) + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \kappa \frac{\partial T_c}{\partial x_k} \right). \quad (21)$$

## 2.2. Обмен объемом между фазами

Для замыкания системы необходимо определить функции  $w$ ,  $J$  и  $Q$ . Представим дисперсную фазу в виде сферических объектов, тогда объем дисперсной фазы можно определить следующим образом:

$$V_d = \sum_j \frac{4}{3} \pi R_j^3 N_j, \quad (22)$$

где  $R_j$  — радиус сферической дисперсной частицы,  $N_j$  — количество дисперсных частиц  $j$ -й группы в объеме смеси  $V$ . Различные группы соответствуют разному времени образования и размеру частиц. Возьмем производную по времени от выражения (22):

$$\frac{dV_d}{dt} = \sum_j \left( N_j 4\pi R_j^2 \frac{dR_j}{dt} + \frac{4}{3} \pi R_j^3 \frac{dN_j}{dt} \right). \quad (23)$$

Подставляя выражение (23) в (7), можно найти скорость увеличения объема дисперсной фазы в единице объема смеси:

$$w = \sum_j \left( \frac{N_j}{V} 4\pi R_j^2 \frac{dR_j}{dt} + \frac{4}{3} \pi \frac{R_j^3}{V} \frac{dN_j}{dt} \right). \quad (24)$$

Концентрация дисперсных частиц типа  $j$  (т. е. количество частиц в единице объема смеси) определяется как  $n_j = N_j/V$ . Продифференцировав обе части этого выражения, определим скорость изменения концентрации частиц  $j$ -го типа:

$$\frac{dn_j}{dt} = \frac{1}{V} \frac{dN_j}{dt} - \frac{N_j}{V^2} \frac{dV}{dt}. \quad (25)$$

Отсюда с учетом равенства (10) получаем

$$\frac{1}{V} \frac{dN_j}{dt} = \frac{dn_j}{dt} + n_j \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k}. \quad (26)$$

Пусть  $\Pi_j$  — скорость изменения количества дисперсных частиц типа  $j$ , отнесенная к единице объема смеси, тогда

$$\Pi_j = \frac{1}{V} \frac{dN_j}{dt} = \frac{dn_j}{dt} + n_j \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k}. \quad (27)$$

Из равенств (24), (26) и (27) получаем скорость изменения объема  $w$  и скорость изменения концентрации дисперсных частиц:

$$w = \sum_j \left( n_j 4\pi R_j^2 \frac{dR_j}{dt} + \frac{4}{3} \pi R_j^3 \Pi_j \right), \quad (28)$$

$$\frac{dn_j}{dt} = \Pi_j - n_j \sum_{k=1}^N \frac{\partial v_k}{\partial x_k}. \quad (29)$$

### 2.3. Изменение радиуса и скорость нуклеации полостей в расплаве

Найдем выражение для изменения радиуса дисперсных частиц. При указании на фазу пара будем использовать индекс  $v$ , при указании на жидкость — индекс  $l$ . Индекс  $d = v$  означает, что дисперсная фаза является паром и т. д. При малой объемной доле пузырьков пара  $\alpha_{d=v}$  и среднем расстоянии между ними существенно большем их диаметров пузырьки можно считать независимыми друг от друга и описывать уравнением Рэлея–Плессета [33]. Рассмотрим пузырек пара в несжимаемой жидкости. Пузырек может расширяться или сжиматься под действием разности давлений пара и жидкости, получим уравнение для изменения его радиуса  $R$ . Систему будем характеризовать функцией Лагранжа  $L = -U_S - U_V + T_K$ , где  $U_S$  — энергия поверхностного натяжения,  $U_V$  — потенциальная энергия пузырька в поле давления,  $T_K$  — кинетическая энергия движения жидкости вокруг пузырька.

Будем считать жидкость вокруг пузырька несжимаемой, а течение установившимся. Следовательно,

$\rho = \text{const}$ , что справедливо при  $R/c \ll \tau$ , где  $c$  — скорость звука в окружающей жидкости,  $\tau$  — характерное время изменения внешних условий (порядка длительности импульса облучения  $\tau \approx 10^{-10}$ – $10^{-8}$  с). Пусть течение сферически симметричное, тогда поток жидкости через сферическую поверхность, охватывающую пузырек, равен

$$\int_S \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = 4\pi r^2 v(r) = \text{const}$$

в силу несжимаемости жидкости. На границе  $v(r) = \dot{R}$ , тогда  $4\pi r^2 v(r) = 4\pi R^2 \dot{R}$ , а выражение для скорости жидкости будет иметь вид

$$v(r) = (R/r)^2 \dot{R}, \quad (30)$$

где точка сверху обозначает производную по времени. Выражение для кинетической энергии имеет вид

$$T_K = \int_{r>R} \frac{\rho v^2}{2} dV = \frac{\rho}{2} \int_R^\infty v^2 4\pi r^2 dr = 2\pi R^3 \rho \dot{R}^2. \quad (31)$$

Энергия поверхностного натяжения может быть записана как

$$U_S = 4\pi R^2 \sigma, \quad (32)$$

где  $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения.

Выражение для элементарной работы при увеличении объема пузырька на величину  $\delta V$  можно представить следующим образом:

$$\delta U_V = -(P_{d=v} - P_{c=l}) \delta V,$$

где  $P_{c=l}$  — давление жидкости вокруг пузырька,  $P_{d=v}$  — давление паров внутри пузырька. Таким образом, выражение для потенциальной энергии пузырька в поле сил давления имеет вид

$$U_V = -(P_{d=v} - P_{c=l}) V = -(P_{d=v} - P_{c=l}) \frac{4}{3} \pi R^3. \quad (33)$$

Используя выражения (31)–(33), получаем функцию Лагранжа:

$$L = 2\pi \rho R^3 \dot{R}^2 + (P_{d=v} - P_{c=l}) \frac{4}{3} \pi R^3 - 4\pi R^2 \sigma. \quad (34)$$

Присутствие в системе вязкости приводит к диссипации механической энергии, переходящей в тепло. Введем диссипативную функцию  $F$ , равную половине от скорости убывания механической энергии [34]:

$$F = -\frac{1}{2} \dot{T}_K = \frac{\eta}{4} \int_{r \geq R} \left( \frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 dV, \quad (35)$$

где  $\eta$  — коэффициент вязкости. Используя формулу (30) для скорости среды и вычисляя интеграл (35), получаем выражение для диссипативной функции:

$$F = \eta \int_R^\infty \left( \frac{dv(r)}{dr} \right)^2 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi}{3} \eta R \dot{R}^2. \quad (36)$$

Уравнение Лагранжа с учетом диссипации имеет вид [34]

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{R}} \right) = \frac{\partial L}{\partial R} - \frac{\partial F}{\partial \dot{R}}. \quad (37)$$

Учитывая выражения (34) и (35), вычислим входящие в (37) производные:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{R}} &= 4\pi \rho R^3 \dot{R}, \\ \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{R}} \right) &= 4\pi \rho R^3 \ddot{R} + 12\pi \rho R^2 \dot{R}^2, \end{aligned} \quad (38)$$

$$\frac{\partial L}{\partial R} = 6\pi \rho R^2 \dot{R}^2 + (P_{d=v} - P_{c=l}) 4\pi R^2 - 8\pi R \sigma, \quad (39)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \dot{R}} = \frac{8\pi}{3} \eta R \dot{R}. \quad (40)$$

Подставляя (38)–(40) в уравнение Лагранжа (37), получаем уравнение для радиуса пузырька при известной разности давлений ( $P_{d=v} - P_{c=l}$ ):

$$\begin{aligned} \ddot{R}_j &= -\frac{3}{2} \frac{\dot{R}_j^2}{R_j} + \left[ P_{d=v} - P_{c=l} - \frac{2\sigma}{R_j} \right] \frac{1}{R_j \rho_l} - \\ &\quad - \frac{2}{3} \frac{\eta_l}{\rho_l} \frac{\dot{R}_j}{R_j^2}. \end{aligned} \quad (41)$$

Рассмотрим гомогенную нуклеацию пузырьков пара в расплаве металла. Согласно [24] критический радиус пузырька пара равен

$$R_{cr} = 2\sigma / (P_v^* - P_{c=l}), \quad (42)$$

где  $P_v^*$  — давление насыщенных паров, соответствующее температуре  $T_{c=l}$ . Пузырьки большего радиуса будут расти, меньшего — заживаться. Пузырьки критического радиуса образуются за счет тепловых флуктуаций и далее растут в соответствии с уравнением (41). Для этого нужно, чтобы во вновь образовавшихся пузырьках начальное значение  $P_{d=v}$  было равно  $P_v^*$ . Работа образования пузырька критического радиуса [24]

$$W_{cr} = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma^3}{(P_v^* - P_{c=l})^2}. \quad (43)$$

Вероятность тепловой флуктуации [35], приводящей к образованию пузырьков критического радиуса,

равна  $\exp(-W_{cr}/k_B T)$ , где  $k_B$  — постоянная Больцмана. Тогда скорость гомогенной нуклеации пузырьков в единице объема смеси можно записать как

$$\Pi_j = \delta_{jj_0} f n_a \exp\left(-\frac{W_{cr}}{k_B T}\right) \alpha_{c=l}, \quad (44)$$

где  $n_a = a^{-3}$  — концентрация атомов в расплаве,  $a$  — среднее межатомное расстояние,  $f$  — частотный фактор. Дельта-символ  $\delta_{jj_0}$  означает, что гомогенная нуклеация приводит к образованию пузырьков только типа  $j_0$  с радиусами близкими к критическому  $R_{j_0} \approx R_{cr}$ . Для частотного фактора можно было бы использовать оценку  $f = c_l/a \approx 10^{12}$  Гц. Однако результаты молекулярно-динамических исследований [27] показывают, что частотный фактор должен быть приблизительно на два порядка больше этой оценки, как и других классических оценок. Поэтому в работе мы использовали  $f = 100c_l/a \approx 10^{14}$  Гц. Следует отметить, что изменение частотного фактора на два порядка величины приводит к изменению прочности расплава в пределах 10 %.

Вернемся к динамике изменения размера пузырьков. Уравнение (41) будем использовать при  $\alpha_{d=v} < \alpha_{c=l}$ . В расчетах использовалось значение параметра  $\alpha_{c=l} \approx 0.03$ , что соответствует предельному размеру пузырьков порядка третьей части от среднего расстояния между ними. Начальная стадия роста, описываемая уравнением (41), определяет скорость разгрузки растягивающих напряжений и количество образовавшихся пузырьков. При большом размере пузырьков взаимодействие между ними становится существенным, что делает описание их динамики более сложной задачей. С другой стороны, при больших объемных долях пузырьков растягивающие напряжения в пузырьковой жидкости близки к нулю, новые пузырьки не образуются. Поэтому на данной стадии допустимо грубое описание динамики изменения радиуса пузырьков. Пузырьки и окружающая жидкость стремятся выравнять свои давления, чего требует одно из условий межфазного равновесия. Обозначим через  $\rho_l^*$  плотность жидкого металла, при которой его давление будет равно давлению насыщенных паров. Величина  $\rho_l^*$  может быть найдена из уравнения состояния. Если  $\alpha_{d=v}$  и  $\alpha_{c=l}$  — текущие объемные доли дисперсной и несущей фаз, то при неизменном полном объеме элемента смеси  $V$  межфазное равновесие по давлению установится при объемной доле пара, равной

$$\alpha_v^* = \alpha_{d=v} + \alpha_{c=l} \left( 1 - \frac{\rho_{c=l}}{\rho_l^*} \right), \quad (45)$$

где  $\rho_{c=l}$  — текущая плотность несущей жидкой фа-

зы. При полной концентрации  $n = \sum_j n_j$  такая объемная доля соответствует радиусу пузырьков

$$R^* = \sqrt[3]{\frac{3\alpha_v^*}{4\pi n}}, \quad (46)$$

при выравнивании давлений пузырьки будут стремиться к такому значению радиусов. Скорость роста пузырьков при  $\alpha_{d=v} > \alpha_{cr}$  оценим из условия

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{\tau_R}(R^* - R_j), \quad (47)$$

где  $\tau_R$  — характерное время роста, имеющее порядок  $\tau_R = R^*/c_l$ , а  $c_l$  — скорость звука в жидкой фазе. Окончательно получаем

$$\frac{dR_j}{dt} = c_l \left( 1 - R_j \sqrt[3]{\frac{4\pi n}{3\alpha_v^*}} \right). \quad (48)$$

Будем считать, что перколяционный переход, состоящий в распаде жидкости с пузырьками на отдельные капли, происходит, когда объемная доля пара достигнет значения  $\alpha_{fr} \approx 0.5$  (приближение модели). Также будем считать, что распределение по размерам пузырьков до перколяционного перехода совпадает с распределением капель после него. При объединении пузырьков могут формироваться и более мелкие капли, но в данной работе этим пренебрегается.

#### 2.4. Изменение размеров и концентрации капель после разрушения расплава

Рассмотрим систему «пар–капли». Уравнение для изменения радиуса капель в процессе установления межфазного равновесия по давлению может быть получено аналогично уравнению Рэлея–Плессета. Жидкость внутри капли нельзя считать несжимаемой. Предположим, что происходит однородное изменение объема жидкости, т. е. изменение объема каждого элемента пропорционально самому объему этого элемента жидкости  $\dot{V} = CV$ , где  $C$  — некоторая константа. Рассматривая в качестве объемов  $V$  сферы радиусом  $r \leq R$ , запишем  $\dot{V} = 4\pi r^2 v$ , тогда  $v(r) = Cr$ . Скорость изменения радиуса капли  $v(R) = \dot{R} = CR$ , откуда для константы  $C$  получаем  $C = \dot{R}/R$ . Окончательно скорость движения жидкости в капле выразим как

$$v(r) = \dot{R}(r/R). \quad (49)$$

Для кинетической энергии движения жидкости, связанного с расширением или сжатием капли, получаем

$$T_K = \frac{4\pi\rho}{2} \int_0^R v^2 r^2 dr = \frac{2\pi\rho}{5} R^3 \dot{R}^2. \quad (50)$$

Диссипативная функция в данном случае равна

$$F = \frac{\pi}{3} \eta R \dot{R}^2. \quad (51)$$

Потенциальная энергия определяется как

$$U_V + U_S = -(P_{d=l} - P_{c=v})(4\pi/3)R^3 + 4\pi\sigma R^2. \quad (52)$$

Первое слагаемое в правой части формулы (52) определяет работу по изменению объема капли, второе слагаемое характеризует энергию поверхностного натяжения. Найдём производные по  $R$  и  $\dot{R}$  от функции Лагранжа и диссипативной функции:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{R}} &= \frac{4\pi}{5} \rho R^3 \dot{R}, \\ \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{R}} \right) &= \frac{12\pi}{3} \rho R^2 \dot{R}^2 + \frac{4\pi}{3} \rho R^3 \ddot{R}, \end{aligned} \quad (53)$$

$$\frac{\partial L}{\partial R} = \frac{6\pi}{5} \rho R^2 \dot{R}^2 + (P_{d=l} - P_{c=v})4\pi R^2 - 8\pi\sigma R, \quad (54)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \dot{R}} = \frac{2\pi}{3} \eta R \dot{R}. \quad (55)$$

Из (37) с учетом (50)–(52) получаем уравнение для радиуса капли:

$$\begin{aligned} \ddot{R}_j &= -\frac{3}{2} \frac{\dot{R}_j^2}{R_j} + \left[ P_{d=l} - P_{c=v} - \frac{2\sigma}{R_j} \right] \frac{5}{R_j \rho_l} - \\ &\quad - \frac{5}{6} \frac{\eta}{\rho_l} \frac{\dot{R}_j}{R_j^2}. \end{aligned} \quad (56)$$

Данное уравнение использовалось нами при произвольной объемной доле капель.

В системе «пар–капли» для малых капель кроме среднего макроскопического движения имеет место тепловое (броуновское) со среднеквадратичной скоростью

$$U_j = \sqrt{3k_B T_{c=v}/m_j}, \quad (57)$$

где  $m_j = (4\pi/3)R_j^3 \rho_{d=l}$  — масса одной капли  $j$ -го типа. Броуновское движение может сопровождаться столкновениями и коагуляцией капель, что приводит к изменению их количества и распределения по размерам. В работе [36] получено следующее выражение для частоты столкновений капель типов  $j$  и  $j'$  в единице объема смеси в единицу времени:

$$Z_{jj'} = \pi(R_j + R_{j'})^2 n_j n_{j'} (U_j + U_{j'}). \quad (58)$$

Оценим долю капель, испытывающих коагуляцию за характерное время процесса  $t_0 \approx 10^{-6}$  с. Для концентрации используем оценку сверху:

$$n_j \approx n_{j'} \approx \frac{1}{8R^3} \frac{1}{2}$$

(концентрация капель в момент перколяционного перехода), для плотности жидкой фазы примем величину  $\rho_l \approx 3 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>. Тогда получаем при  $R \approx 10^{-6}$  м и  $T \approx 3000$  К

$$\frac{1}{n} \frac{dN}{dt} t_0 \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \sqrt{\frac{kT}{\rho_l}} \frac{1}{R^2 \sqrt{R}} \approx 0.003. \quad (59)$$

Таким образом, для капель микрометрового диапазона размеров влияние коагуляции пренебрежимо мало, хотя при  $R = 100$  нм она уже значима.

Для скорости изменения количества капель в единице объема смеси в результате коагуляции имеем

$$\begin{aligned} \Pi_j = & - \sum_{j'} \pi(R_j + R_{j'})^2 n_j n_{j'} (U_j + U_{j'}) A_{jj'} + \\ & + \sum_{j' < j} \sum_{j'' < j'} \pi(R_{j''} + R_{j'})^2 n_{j''} n_{j'} (U_{j''} + U_{j'}) \times \\ & \times A_{j''j'} \delta(R_j^3 - R_{j'}^3 - R_{j''}^3), \quad (60) \end{aligned}$$

где  $A_{jj'}$  — вероятность коагуляции при столкновении, мы использовали значение  $A_{jj'} = 0.5$ . Первое слагаемое в правой части характеризует убыль капель типа  $j$  в результате столкновений со всеми другими типами капель. Второе слагаемое описывает появление капель типа  $j$  в результате столкновения более мелких капель,  $\delta$ -функция учитывает закон сохранения массы капель при коагуляции (считается, что их плотности примерно равны друг другу).

## 2.5. Обмен массой

Масса дисперсной фазы  $m_d$  в элементе объема  $V$  смеси равна

$$m_d = \sum_j m_j N_j, \quad (61)$$

где  $m_j$  — масса дисперсной частицы типа  $j$ , а  $N_j$  — количество таких частиц в объеме  $V$ ; суммирование ведется по группам частиц. Изменение массы дисперсной фазы определяется как

$$\frac{dm_d}{dt} = \sum_j \frac{dm_j}{dt} N_j + \sum_j m_j \frac{dN_j}{dt}. \quad (62)$$

Учитывая выражение (13), получаем скорость роста массы дисперсной фазы:

$$J = \sum_j \frac{dm_j}{dt} n_j + \sum_j m_j \Pi_j. \quad (63)$$

Определим изменение массы одной дисперсной частицы. Рассмотрим систему «жидкость–пар». Работа образования пузырька пара, содержащего  $g$  атомов, может быть записана как сумма молекулярной работы, связанной с переходом атомов между фазами, и работы против сил поверхностного натяжения:

$$W(g) = -k_B T_{c=l} \ln(P_v^*/P_v) g + 4\pi R_1^2 \sigma g^{2/3}, \quad (64)$$

где  $R_1 = \sqrt[3]{3m_1/4\pi\rho_v^*}$ ;  $m_1$  — масса атома;  $\rho_v^*$  и  $P_v^*$  — плотность и давление насыщенных паров металла при температуре окружающей жидкости  $T_{c=l}$ . Для определения скорости роста массы пузырьков интерес представляют два противоположных процесса: переход атомов из окружающей жидкости в пузырек (прямая реакция) и переход атомов из пара в жидкость (обратная реакция). Скорость обратной реакции определяется количеством столкновений атомов с границами пузырька. Количество столкновений, приходящихся на один пузырек в единицу времени, может быть оценено примерно как  $g c_{d=v}/2R$ , где  $c_{d=v}$  — скорость звука в паре. Скорость обратной реакции (количество переходов в единицу времени пузырьков, содержащих  $g$  молекул, в пузырьки, содержащие  $g-1$  молекулу) равна  $A n_g g c_{d=v}/2R$ . Здесь  $n_g$  — концентрация пузырьков, содержащих  $g$  молекул,  $A$  — коэффициент аккомодации (вероятность захвата), мы использовали значение  $A = 0.5$ . Скорость обратной реакции можно записать как  $K_g n_{g-1}$ , где  $K_g$  — коэффициент, характеризующий скорость реакции. Следовательно, получаем

$$K_g n_{g-1} = A n_g g c_{d=v}/2R. \quad (65)$$

В состоянии равновесия для пузырьков должно установиться распределение Гиббса [35]:

$$n_g = n_0 \exp(-W(g)/k_B T_{c=l}), \quad (66)$$

где  $n_0$  — константа. Следовательно, коэффициент скорости реакции равен

$$\begin{aligned} K_g &= A g \frac{c_{d=v}}{2R} \frac{n_g}{n_{g-1}} = \\ &= g \frac{c_{d=v}}{2R} \exp\left(-\frac{W(g) - W(g-1)}{k_B T_{c=l}}\right). \quad (67) \end{aligned}$$

Разность работ аппроксимируем производной

$$\begin{aligned} W(g) - W(g-1) &= \partial W(g)/\partial g = \\ &= -k_B T_{c=l} \ln(P_v^*/P_v) + (8\pi/3) R_1^2 \sigma g_j^{-1/3}. \quad (68) \end{aligned}$$

Скорость роста массы пузырька типа  $j$  отсюда получается равной



$$\frac{dm_j}{dt} = Am_j \frac{2R_j}{c_{d=v}} \times \left[ \frac{P_v^*}{P_v} \exp\left(-\frac{4\pi R_1^2 \sigma}{3k_B T_{c=l} g_j^{1/3}}\right) - 1 \right], \quad (69)$$

где  $g_j = m_j/m_1$  — число атомов пара в пузырьке типа  $j$ .

Для системы «пар–капли» аналогичным образом может быть получено [36]

$$\frac{dm_j}{dt} = \pi R_j L_j c_{c=v} \rho_{c=v} \times \left[ 1 - \frac{P_v^*}{P_v} \exp\left(\frac{4\pi R_1^2 \sigma}{3k_B T_{c=v} g_j^{1/3}}\right) \right], \quad (70)$$

где  $L_j = \min\{AR_j, 4\lambda/3\}$ ,  $\lambda = m_1/(\Sigma\rho_v)$  — длина свободного пробега в паровой фазе,  $\Sigma$  — эффективное сечение рассеяния атома пара. Формула (70) учитывает режим свободномолекулярного течения (режим эффузии), когда размер капель меньше длины свободного пробега, и континуальный режим (режим диффузии), когда размер капель больше длины свободного пробега.

### 2.6. Теплообмен

Рассмотрим теплообмен в системе «жидкость с пузырьками». Под теплообменом понимается передача тепловой энергии при упругих столкновениях молекул пара со стенками пузырьков. В единицу времени в единице объема смеси происходит следующее число столкновений:

$$\sum_j \frac{n_j g_j c_v}{2R_j}.$$

Из них доля  $A$  приходится на неупругие столкновения, когда молекулы пара конденсируются на стенках пузырька, оставшаяся доля  $(1 - A)$  приходится на упругие столкновения. При каждом столкновении пару внутри пузырька в среднем передается энергия  $(T_{c=l} - T_{d=v})C_V m_1/2$ , где  $C_V$  — удельная изохорная теплоемкость пара. В результате скорость теплообмена в единице объема равна

$$Q = (T_{c=l} - T_{d=v})C_V c_v \sum_j \left[ \frac{(1 - A)m_j}{4R_j} \right] n_j. \quad (71)$$

Для системы «пар–капли» аналогично может быть получено

$$Q = (T_{c=v} - T_{d=l})C_V c_v \sum_j [\pi\rho_v R_j L_j^*] n_j, \quad (72)$$

где  $L_j^* = \min\{(1 - A)R_j/2; 4\lambda/3\}$ .

### 3. ПАРАМЕТРЫ КОНТИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ И ПРОЧНОСТЬ РАСПЛАВА

Основным параметром, определяющим прочность расплава и размер образующихся капель, является поверхностное натяжение. В случае малого пузырька, размер которого сопоставим с межатомным расстоянием, величина коэффициента поверхностного натяжения зависит от радиуса пузырька. Для учета этой зависимости использовалась формула Толмена [26]

$$\sigma = \frac{\sigma'}{1 + a/2R}, \quad (73)$$

где  $a$  — среднее межатомное расстояние,  $\sigma'$  — поверхностное натяжение для плоской поверхности,  $\sigma$  — поверхностное натяжение для пузырька радиуса  $R$ .

Поверхностное натяжение существенно зависит от температуры вещества. В работе [38] показано, что коэффициент поверхностного натяжения расплава линейно уменьшается с ростом температуры. В соответствии с этим температурную зависимость  $\sigma(T)$  можно представить как

$$\sigma'(T) = \sigma_m - K_\sigma(T - T_m), \quad (74)$$

где  $\sigma_m$  — величина поверхностного натяжения жидкого металла при температуре плавления  $T_m$ ; коэффициент  $K_\sigma$  представляет собой модуль производной поверхностного натяжения по температуре, этот коэффициент полагается постоянным. Поскольку в критической точке поверхностное натяжение должно обращаться в нуль,  $\sigma(T_K) = 0$ , значение последнего коэффициента можно найти как  $K_\sigma = \sigma_m/(T_K - T_m)$ , где  $T_K$  — критическая температура. В таблице приведены используемые в работе значения параметров  $\sigma_m$ ,  $K_\sigma$  и  $T_m$  для алюминия, меди и никеля.

Исходя из интерполяционной формулы, предложенной в работе [41], можно записать следующую аппроксимацию для зависимости вязкости жидких металлов  $\eta$  от их плотности  $\rho$ :

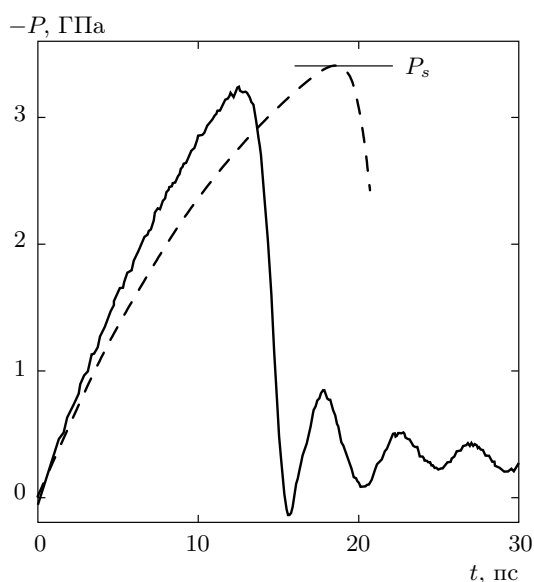
$$\eta(\rho) = \frac{\eta_0}{\rho_\infty/\rho - 1}, \quad (75)$$

где  $\eta_0$  — параметр с размерностью вязкости,  $\rho_\infty$  — плотность вещества, при которой вязкость обратилась бы в бесконечность, а текучесть в нуль [41].

Термодинамическое состояние вещества, в частности, зависимость давления от плотности и температуры, описывается уравнением состояния  $P = P(\rho, T)$ . В работе использовалась метастабильная форма широкодиапазонных уравнений состояния [37, 39] (см. таблицу).

**Таблица.** Параметры температурной зависимости поверхностного натяжения [38] и зависимости вязкости расплава от плотности вещества [41]

	Al	Cu	Ni
$\sigma_m$ , Дж/м <sup>2</sup> [38]	1.031	1.352	1.810
$K_\sigma$ , мДж/(м <sup>2</sup> ·К)	0.146	0.192	0.242
$T_m$ , К [38]	933	1358	1728
$T_K$ , К	8000 [39]	8390 [39]	9460 [40]
$\eta_0$ , мкПа·с [41]	91	454	645
$\rho_\infty$ , г/см <sup>3</sup> [41]	2.70	8.95	8.76
Уравнение состояния	[39]	[39]	[37]



**Рис. 1.** Зависимости давления от времени при растяжении расплава алюминия с постоянной скоростью деформации ( $10^9 \text{ с}^{-1}$ ) при постоянной температуре (2000 К): штриховая кривая — континуальная модель, сплошная кривая — молекулярная динамика

Для вычисления прочности рассматривалась модельная задача растяжения расплава при постоянной температуре (расплав в термостате) и с постоянной скоростью изменения объема  $\dot{V} = \dot{\epsilon}V_0$ , где  $\dot{\epsilon}$  — скорость деформации,  $V_0$  — начальный объем. С точки зрения модели это означает, что уравнение движения (4) и уравнения (19), (21) для внутренней энергии не решаются, а дивергенция скорости

$\sum_{k=1}^N (\partial v_k / \partial x_k)$  во всех остальных уравнениях заменяется на  $\dot{\epsilon}(V_0/V)$ . В результате получается система обыкновенных дифференциальных уравнений, все величины зависят только от времени, а зависимость от координаты исчезает. Рассчитанная зависимость давления от времени представлена на рис. 1 (кривая 1). На начальном этапе деформирования расплав однороден, отрицательное давление в нем монотонно увеличивается по модулю. При достаточно высоком уровне растягивающих напряжений начинается образование пузырьков (44), а затем и их рост (41). С течением времени скорость роста объема пузырьков в расплаве  $wV$  начинает превышать скорость увеличения объема системы  $\dot{V} = \dot{\epsilon}V_0$ . Уменьшение плотности расплава сменяется ее ростом, а модуль давления, напротив, достигает максимума и начинает уменьшаться. Максимальное значение модуля отрицательного давления  $P_s$  (см. рис. 1) представляет собой прочность расплава. Так были получены значения прочности расплава при различных скоростях деформации и температурах, которые далее сопоставляются со значениями, полученными из молекулярно-динамического моделирования, и экспериментальными данными (см. разд. 4).

#### 4. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЧНОСТИ РАСПЛАВА

Для проверки полученных по континуальной модели значений прочности (см. разд. 3) мы провели молекулярно-динамическое (МД) моделирование процесса разрушения расплава металла при растяжении с постоянной скоростью изменения объема  $\dot{V} = \dot{\epsilon}V_0$ . Использовался пакет молекулярно-динамического моделирования LAMMPS [42] с потенциалами погруженного атома: [43] — для алюминия и меди и [44] — для никеля. Однородное растяжение моделировалось масштабированием координат атомов [42], система находилась в термостате при постоянной температуре. На всех границах расчетной области задавались периодические граничные условия. Основные расчеты проводились на системах, содержащих порядка ста тысяч атомов. При рассматриваемых скоростях деформации ( $10^9 \text{ с}^{-1}$  и более) этого количества атомов достаточно для обеспечения точности определения откольной прочности порядка нескольких процентов. Об этом свидетельствуют дополнительные расчеты для систем с большим и меньшим количеством атомов.

Из молекулярно-динамических расчетов определялись зависимости давления от времени. Харак-

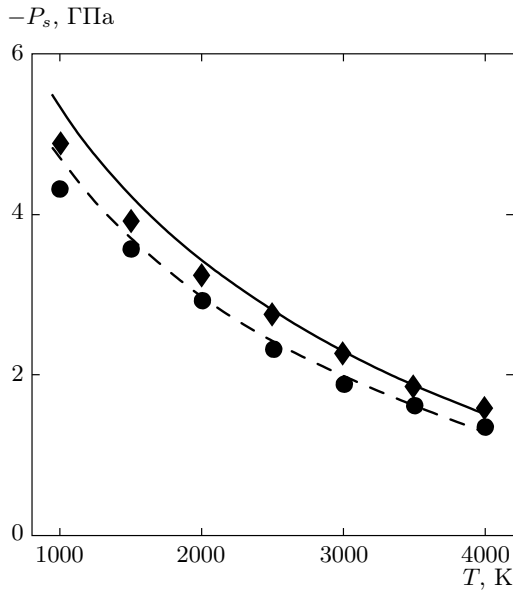


Рис. 2. Зависимость прочности расплава алюминия от температуры при скоростях деформации  $10^9 \text{ с}^{-1}$  (штриховая кривая, точки) и  $10^{10} \text{ с}^{-1}$  (сплошная кривая, ромбы): сравнение результатов расчетов по континуальной модели (кривые) и молекулярно-динамического моделирования (символы)

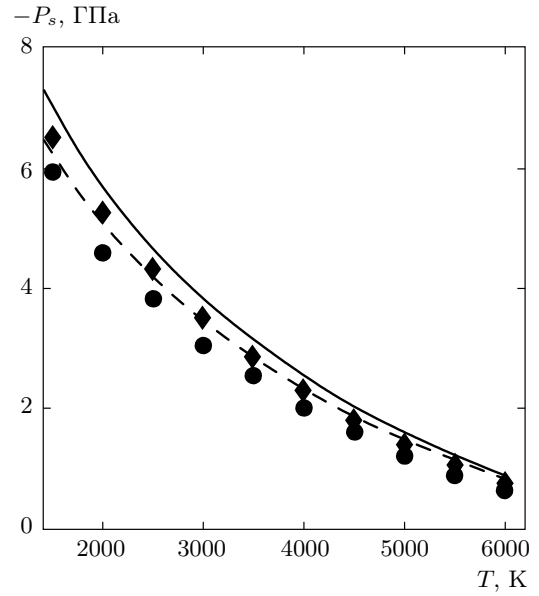


Рис. 3. Зависимость прочности расплава меди от температуры при скоростях деформации  $10^9 \text{ с}^{-1}$  (штриховая кривая, точки) и  $10^{10} \text{ с}^{-1}$  (сплошная кривая, ромбы): сравнение результатов расчетов по континуальной модели (кривые) и молекулярно-динамического моделирования (символы)

терная зависимость  $P(t)$  представлена на рис. 1 (сплошная кривая) в сравнении с результатом континуального моделирования (штриховая кривая). Наблюдается различие в наклоне кривых, этот наклон определяется уравнением состояния для континуальных расчетов и межатомным потенциалом для МД-моделирования. Максимум (по модулю) отрицательного давления соответствует образованию и интенсивному расширению полостей в моделируемом образце. Как следует из представленных на рис. 1 данных, несмотря на различие в наклонах кривых, максимальные отрицательные давления (откольные прочности) близки для случая континуальных и МД-расчетов.

На рис. 2, 3 и 4 представлены рассчитанные по континуальной модели и определенные на основе МД-моделирования зависимости величины откольной прочности от температуры соответственно для расплавов алюминия, меди и никеля. Следует еще раз подчеркнуть, что в континуальной модели использовались литературные данные по поверхностному натяжению и вязкости расплавов, представленные в таблице, никакой специальной подгонки параметров модели не проводилось. Наблюдается соответствие между МД- и континуальной моделью по поведению прочности с изменением температуры и

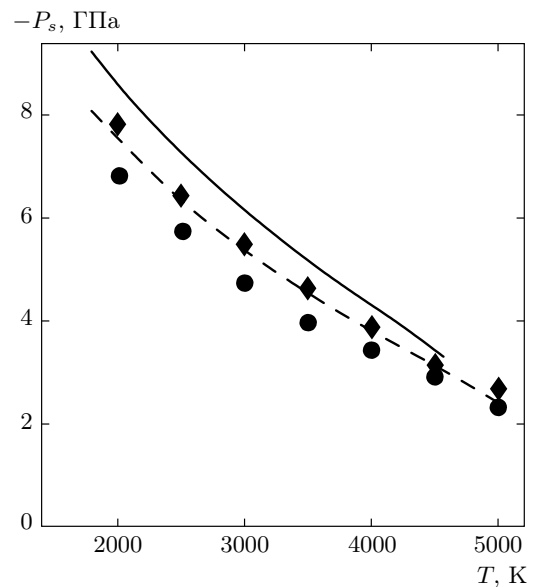
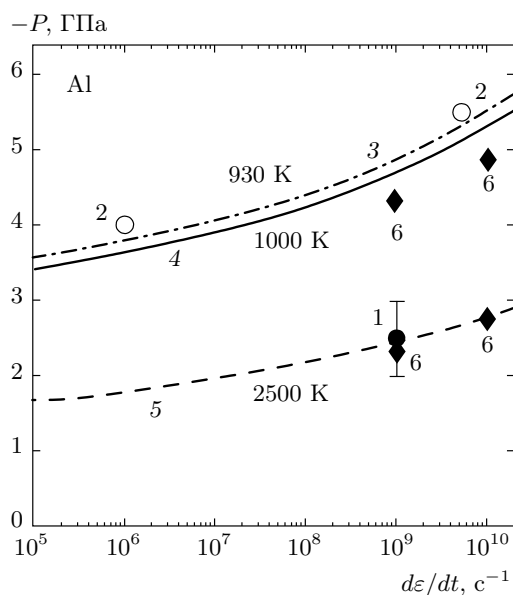


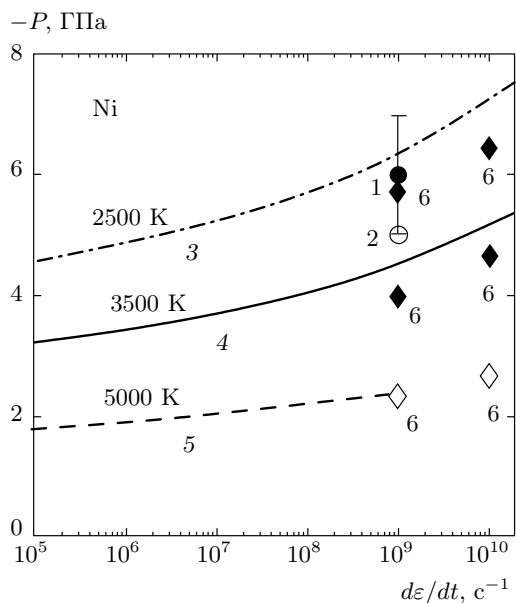
Рис. 4. Зависимость прочности расплава никеля от температуры при скоростях деформации  $10^9 \text{ с}^{-1}$  (штриховая кривая, точки) и  $10^{10} \text{ с}^{-1}$  (сплошная кривая, ромбы): сравнение результатов расчетов по континуальной модели (кривые) и молекулярно-динамического моделирования (символы)



**Рис. 5.** Зависимости прочности расплава алюминия от скорости деформации при температурах 930 К (точка 2, кривая 3), 1000 К (кривая 4, верхние символы 6) и 2500 К (кривая 5, символ 1 с интервалом погрешности, нижние символы 6). Сравнение результатов расчетов по континуальной модели (кривые 3, 4 и 5), молекулярно-динамического моделирования (символы 6) с экспериментальными данными [20] (символ 1 с интервалом погрешности) и расчетами [27] (символы 2)

скорости деформации, что свидетельствует об адекватности описания в рамках континуальной модели. Кроме того, наблюдается количественное соответствие результатов МД- и континуальной модели, что может интерпретироваться как взаимная верификация параметров модели (таблица) и межатомных потенциалов [43, 44].

На рис. 5 и 6 представлены зависимости прочности от скорости деформации для алюминия и никеля. Помимо результатов континуального моделирования и наших МД-расчетов нанесены данные экспериментов [20] и расчетов [20, 27]. Как следует из рис. 5, для алюминия наблюдается хорошее соответствие наших результатов с данными экспериментов [20] и моделирования [27]. Для никеля (см. рис. 6) наши результаты (кривая 4) лежат ниже нижней границы интервала погрешности экспериментальных данных [20] (символ 1 с интервалом) и ниже МД-расчетов работы [20] (символ 2). Различие по величине прочности составляет соответственно 25 % и 10 %, что можно считать удовлетворительной оценкой.



**Рис. 6.** Зависимости прочности расплава никеля от скорости деформации при температурах 2500 К (кривая 3, верхние символы 6), 3500 К (символ 1 с интервалом погрешности, символ 2, кривая 4, средние символы 6) и 5000 К (кривая 5, нижние символы 6). Сравнение результатов расчетов по континуальной модели (кривые 3, 4, 5), молекулярно-динамического моделирования (символы 6) с экспериментальными данными [20] (символ 1 с интервалом погрешности) и расчетами [20] (символ 2)

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена континуальная модель разрушения расплава металла в условиях интенсивного объемного энерговыделения. Для описания двухфазного состояния используется подход механики сплошной гетерогенной среды в односкоростном приближении. Записаны уравнения кинетики фазовых переходов: рассмотрены изменение объема дисперсной и несущей фаз, изменение количества дисперсных частиц, описаны обмен массой за счет фазовых переходов и теплообмен между фазами. Образование полостей в растянутом металле учитывается как термофлуктуационный процесс. Модель может быть использована для численного исследования процессов интенсивного лазерного или электронного облучения металлов.

При помощи предложенной модели с использованием литературных данных для ее параметров (поверхностное натяжение и вязкость) вычислена прочность алюминия, меди и никеля при различных температурах и скоростях деформации. Помимо

этого, проведены молекулярно-динамические расчеты прочности расплавов тех же металлов при скоростях деформации не менее  $10^9$  с<sup>-1</sup>, которые показали хорошее качественное и количественное соответствие с результатами континуального моделирования. Также показано соответствие наших результатов экспериментальным данным [20] и расчетам [20, 27] других авторов. С увеличением скорости деформации прочность расплава увеличивается медленно, а увеличение температуры, приводит к относительно быстрому понижению прочности. Повышение температуры до величины порядка критической приводит к тому, что расплав начинает разрушаться при значениях отрицательного давления, близких к нулю. При более низких температурах в расплаве могут достигаться значительные отрицательные давления до начала разрушения.

Молекулярно-динамические расчеты прочности расплавов и тестирование континуальной модели (разд. 4) выполнены при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-11-00538), остальные части работы выполнены при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-01-31454).

## ЛИТЕРАТУРА

1. С. И. Анисимов, А. М. Прохоров, В. Е. Фортгов, УФН **142**, 395 (1984).
2. Y. P. Meshcheryakov and N. M. Bulgakova, Appl. Phys. A **82**, 363 (2006).
3. N. V. Tarasenko, A. V. Butsen, E. A. Nevar, and N. A. Savastenko, Appl. Surf. Sci. **252**, 4439 (2006).
4. M. E. Povarnitsyn, T. E. Itina, M. Sentis, K. V. Khishchenko, and P. R. Levashov, Phys. Rev. B **75**, 235414 (2007).
5. N. N. Nedialkov, P. A. Atanasov, S. Amoruso, R. Bruzese, and X. Wang, Appl. Surf. Sci. **253**, 7761 (2007).
6. K. Amikura, T. Kimura, M. Hamada, N. Yokoyama, J. Miyazaki, and Y. Yamada, Appl. Surf. Sci. **254**, 6976 (2008).
7. J. C. Alonso, R. Diamant, P. Castillo, M. C. Acosta-Garcia, N. Batina, and E. Haro-Poniatowski, Appl. Surf. Sci. **255**, 4933 (2009).
8. R. A. Ganeev, G. S. Boltaev, R. I. Tugushev, and T. Usmanov, Appl. Phys. A **100**, 119 (2010).
9. V. Rotshtein, Yu. Ivanov, and A. Markov, in *Materials Surface Processing by Directed Energy Techniques*, Elsevier, London (2004), p. 205.
10. S. A. Chistjakov, A. D. Pogrebnyak, and G. E. Remnev, Nucl. Instr. Meth. B **42**, 342 (1989).
11. В. И. Бойко, А. Н. Валяев, А. Д. Погребняк, УФН **169**, 1243 (1999).
12. С. П. Бардаханов, Ю. Я. Гафнер, С. Л. Гафнер, А. И. Корчагин, В. И. Лысенко, А. В. Номоев, ФТТ **53**, 797 (2011).
13. L. Q. Pham, J. H. Sohn, J. H. Park, H. S. Kang, B. Ch. Lee, and Y. S. Kang, Rad. Phys. Chem. **80**, 638 (2011).
14. П. Кальдиrola, Г. Кнопфель, *Физика высоких плотностей энергии*, Мир, Москва (1974).
15. Г. И. Канель, С. В. Разоренов, А. В. Уткин, В. Е. Фортгов, *Ударно-волновые явления в конденсированных средах*, Янус-К, Москва (1996).
16. А. В. Бушман, Г. И. Канель, А. Л. Ни, В. Е. Фортгов, *Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий*, РИО ИХФ АН СССР, Черноголовка (1988).
17. Y. E. Krasik, A. Grinenko, A. Sayapin, S. Efimov, A. Fedotov, V. Z. Gurovich, and V. I. Oreshkin, IEEE Trans. Plasma Sci. **36**, 423 (2008).
18. В. С. Седой, В. В. Валевич, Письма в ЖЭТФ **25**, 81 (1999).
19. J. A. Sanchez and M. P. Mengüç, J. Appl. Phys. **103**, 054316 (2008).
20. S. I. Ashitkov, P. S. Komarov, A. V. Ovchinnikov, E. V. Struleva, N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, V. V. Zhakhovsky, Yu. N. Emirov, I. I. Oleynik, and M. B. Agranat, *Scientific-Coordination Session on Non-ideal Plasma Physics*, ИИТ RAS, Moscow (2012).
21. М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, С. И. Ашитков, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, П. С. Комаров, А. В. Овчинников, В. Е. Фортгов, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев, Письма в ЖЭТФ **91**, 517 (2010).
22. Y. Chen, H. Hu, Q. Li, R. Wang, and T. Tang, AIP Conf. Proc. **1426**, 1003 (2012).
23. L. Signor, A. Dragon, G. Roy, De. T. Resseguier, and F. Llorca, Arch. Mech. **60**, 323 (2008).
24. В. П. Скрипов, *Метастабильная жидкость*, Наука, Москва (1972).
25. D. D. Joseph, J. Fluid Mech. **366**, 367 (1998).

26. A. Yu. Kuksin, G. E. Norman, V. V. Pisarev, V. V. Stegailov, and A. V. Yanilkin, *Phys. Rev. B* **82**, 174101 (2010).
27. A. Yu. Kuksin, P. R. Levashov, V. V. Pisarev, M. E. Povarnitsyn, A. V. Yanilkin, and A. S. Zakharenkov, *Model of Fracture of Liquid Aluminum Based on Atomistic Simulations*, ed. by V. E. Fortov et al., *Physics of Extreme States of Matter — 2011*, ICP RAS, Chernogolovka (2011), p. 57.
28. J.-L. Shao, P. Wang, A.-M. He, R. Zhang, and Ch.-S. Qin, *J. Appl. Phys.* **114**, 173501 (2013).
29. T. T. Bazhirova, G. E. Norman, and V. V. Stegailov, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 114113 (2008).
30. Р. И. Нигматулин, *Динамика многофазных сред*, Наука, Москва (1987).
31. С. И. Ашитков, Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю. Н. Эмиров, М. Б. Агранат, И. И. Олейник, С. И. Анисимов, В. Е. Фортов, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 192 (2012).
32. В. С. Суров, *ЖТФ* **68**, 12 (1998).
33. А. Е. Дудоров, П. Н. Майер, А. Е. Майер, *Вестн. Челяб. гос. ун-та* **14**(268), *Физика* **13**, 53 (2012).
34. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*. т. I. *Механика*, Наука, Москва (1965).
35. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*. т. V. *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
36. Н. Б. Волков, Е. Л. Фенько, А. П. Яловец, *ЖТФ* **80**, 1 (2010).
37. К. V. Khishchenko, *J. Phys.: Conf. Ser.* **98**, 032023 (2008).
38. H. M. Lu and Q. Jiang, *J. Phys. Chem. B* **109**, 15463 (2005).
39. С. Н. Колгатин, А. В. Хачатурьянец, *ТВТ* **20**, 90 (1982).
40. Ch. Cheng and X. Xu, *Int. J. Thermophys.* **28**, 9 (2007).
41. J. H. Hildebrand and R. H. Lamoreaux, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA. Chemistry* **73**, 988 (1976).
42. S. Plimpton, *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
43. X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, R. A. Johnson, D. J. Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A. K. Petford-Long, G. D. W. Smith, P. H. Clifton, R. L. Martens, and T. F. Kelly, *Acta Mater* **49**, 4005 (2001).
44. X. W. Zhou, R. A. Johnson, and H. N. G. Wadley, *Phys. Rev. B* **69**, 144113 (2004).