

УДК 532.517+621.791

ЧИСЛЕННОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ СТРУИ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ КОСОМ СОУДАРЕНИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИН

С. П. Киселёв¹, В. И. Мали²

¹Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск
kiselev@itam.nsc.ru

²Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Представлены результаты численного и экспериментального моделирования образования струи при высокоскоростном косом соударении металлических пластин, метаемых взрывом. Численное моделирование проводилось методом молекулярной динамики. В экспериментах непосредственно изучали процесс соударения металлических пластин с регистрацией методом импульсной рентгенографии явлений впереди и за точкой контакта. Проведено металлографическое исследование сохраненных образцов. Показано, что численное моделирование методом молекулярной динамики качественно и количественно правильно отражает картину возникновения и развития струи.

Ключевые слова: молекулярная динамика, сварка взрывом, струеобразование, вязкость металлов.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что при высокоскоростном косом соударении металлических пластин возникает кумулятивная струя (рис. 1). Для описания этого явления М. А. Лаврентьевым и Г. Биркгофом была развита теория, в которой течение металлов описывалось моделью идеальной жидкости [1]. Согласно этой теории при малых углах соударения скорость струи в два раза превышает скорость точки контакта. Дальнейшие исследования показали, что это соотношение не всегда выполняется и существуют режимы соударения, при которых скорость струи существенно меньше, чем предсказывает гидродинамическая теория, а на процесс образования струи оказывают влияние сжимаемость, вязкость и прочностные свойства материалов [1–5]. В этих работах процесс соударения пластин рассматривался в рамках различных моделей механики сплошных сред — идеальная и вязкая жидкость,

упругая, упругопластическая, вязкоупругая и другие модели. В окрестности точки соударения пластин возникают большие напряжения и температуры, а скорость деформирования достигает значений 10^7 с^{-1} . Это приводит к изменению физико-механических свойств материалов в процессе деформирования, поэтому использование вышеперечисленных ограниченных моделей может давать ошибочные результаты.

В данной работе для решения этой проблемы предлагается моделировать соударение пластин методом молекулярной динамики (МД) [6], который свободен от указанного ограничения. В настоящее время разработаны достаточно надежные потенциалы взаимодействия атомов в металлах [7, 8], с помощью которых рассчитывают движение атомов при высокоскоростном соударении наночастиц. Однако этот метод не позволяет рассчитать соударение пластин макроскопических размеров, число атомов которых имеет порядок числа Авогадро $N \approx 10^{23}$. Существующие в настоящее время компьютеры не могут рассчитать движение такого числа атомов. Размеры пластин при моделировании методом МД составляют сотни и тысячи ангстрем, что на четыре-пять порядков меньше, чем размеры реальных пластин. Поэтому в данной работе предлагается методом МД моделировать соударение пластин

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 11-01-00357-а), гранта Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ (НШ-5770.2010.1), интеграционного проекта СО РАН № 40, ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы» (шифр заявки 2010-1.1-111-128-024), госконтракта № 14.740.11.0350.

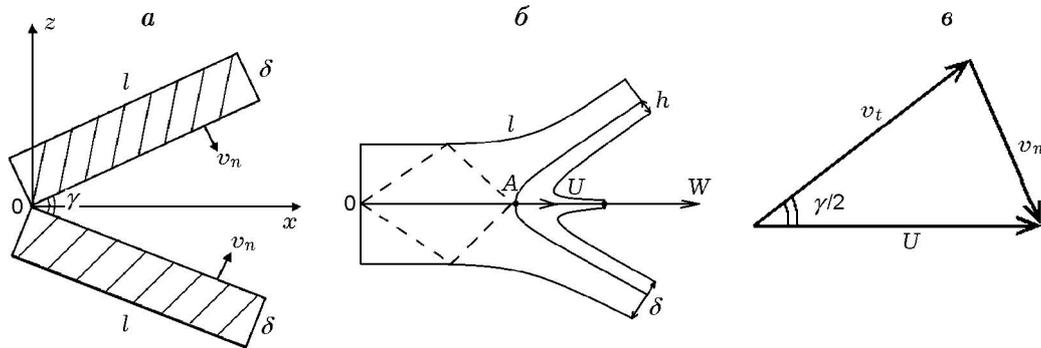


Рис. 1. Схемы соударения пластин (а), струйного течения (б, штриховые линии — траектории волн возмущений, распространяющихся из точки соударения пластин) и скоростей в точке контакта (в)

размером сотни и тысячи ангстрем, а результаты моделирования сравнивать с экспериментальными результатами соударения макроскопических пластин на основании пи-теоремы [1]. Ниже будет показано, что в расчете методом МД и в эксперименте можно достичь одинаковых значений определяющих безразмерных параметров и выполнить закон подобия, необходимый для соответствия модели, используемой в методе МД, и эксперимента по соударению пластин макроскопических размеров.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим две медные пластины толщиной δ , расположенные под углом γ , которые налетают друг на друга со скоростью v_n (см. рис. 1). После их соударения образуется кумулятивная струя, передний фронт которой движется со скоростью W . Задний фронт струи упирается в точку контакта, распространяющуюся со скоростью $U = v_n / \sin(\gamma/2)$. В модели идеальной жидкости скорость W и толщина h кумулятивной струи определяются по формулам [1–3]

$$W = U(1 + \cos(\gamma/2)), \quad h = \delta(1 - \cos \gamma)/2. \quad (1)$$

В экспериментах [3, 5] показано, что действие вязких сил приводит к уменьшению скорости струи вплоть до ее исчезновения. Скорость струи зависит от следующих параметров: $W = \varphi(\gamma, \delta, U, \rho, \eta, \alpha, c, c_t, c_p, T, Y_0)$, где ρ , η , α , c , c_t , c_p , T , Y_0 — плотность, вязкость, коэффициент поверхностного натяжения, продольная и поперечная скорости звука, теплоемкость, температура и предел упругости. Здесь

предполагается, что материал пластин описывается упругопластической моделью, в которой $\sigma_t = Y_0 + \eta \dot{\epsilon}$, где σ_t — касательное напряжение, $\dot{\epsilon}$ — скорость деформации, и не учитываются эффекты теплопроводности. Выбирая в качестве независимых параметров δ , U , ρ , c_p и применяя пи-теорему, получим зависимость безразмерной скорости струи от безразмерных параметров:

$$\frac{W}{U} = f\left(\gamma, \text{Re}, \frac{\alpha}{\rho U^2 \delta}, \frac{c}{U}, \frac{c_t}{U}, \frac{c_p T}{U^2}, \frac{Y_0}{\rho U^2}\right), \quad (2)$$

$$\text{Re} = \frac{\rho U \delta \sin^2(\gamma/2)}{\eta(1 - \sin(\gamma/2))},$$

где Re — число Рейнольдса, в котором в качестве характерного размера R выбрана толщина струи $R \approx h = \delta \sin^2(\gamma/2)$. Множитель в знаменателе $(1 - \sin(\gamma/2))$, введенный ранее в [5], не играет существенной роли при малых углах γ и рассматривается для удобства сравнения с работой [5]. Из выражения (2) следует, что каждый из безразмерных параметров, за исключением второго и третьего, не зависит от толщины пластины и поэтому может иметь одинаковые значения в расчете методом МД и в эксперименте. Во второй и третий безразмерные параметры входит толщина пластины δ , характерное значение которой $\delta_{MD} \approx 100 \text{ \AA}$ в расчетах методом МД; $\delta_{exp} \approx 1 \text{ мм}$ в эксперименте. Характерные размеры остальных параметров соударения в численных расчетах и эксперименте следующие: $U \approx 2 \cdot 10^3 \text{ м/с}$, $\gamma \approx 40^\circ$, $\rho = 8.9 \text{ кг/м}^3$, $\alpha = 1.23 \text{ Н/м}$. В эксперименте вязкость меди при скорости деформации $\dot{\epsilon} \approx 10^7 \text{ с}^{-1}$ равна $\eta \approx 10^4 \text{ Па} \cdot \text{с}$ [5]. В приведенных ниже численных расчетах методом МД

показано, что при $\dot{\epsilon} \approx U/R \approx 10^{12} \text{ с}^{-1}$ вязкость меди имеет величину порядка $\eta \approx 10^{-2} \text{ Па} \cdot \text{с}$. Используя эти численные значения, получаем оценку $\text{Re}_{MD} \approx \text{Re}_{exp} \approx 2$, поэтому значения числа Рейнольдса в МД-расчете и в эксперименте можно сделать совпадающими. Для третьего параметра $\alpha/\rho U^2 \delta$ справедливы оценки $(\alpha/\rho U^2 \delta)_{MD} \approx 2 \cdot 10^{-3}$, $(\alpha/\rho U^2 \delta)_{exp} \approx 2 \cdot 10^{-10}$, из которых следует, что третьим параметром $\alpha/\rho U^2 \delta \ll 1$ в (2) можно пренебречь.

Введем прямоугольную декартову систему координат, в которой ось z направим вертикально, ось x — горизонтально в плоскости рисунка. Каждая пластина представляет собой прямоугольный параллелепипед с ребрами l_x , l_y , l_z , заполненный атомами Си. Вдоль оси y при $y = \pm l_y/2$ выполнялись периодические граничные условия, остальные границы пластин были свободными. Объем параллелепипеда заполнялся атомами Си, которые размещались в узлах ГЦК-решетки с периодом $a = 3.62 \text{ \AA}$. Ребро параллелепипеда l_x совпадало с направлением $[100]$ атомной ГЦК-решетки, ребро l_y — $[010]$, ребро l_z — $[001]$. Рассматривались параллелепипеды следующих размеров $l_x \times l_y \times l_z$: $441 \times 5 \times 17$, $430 \times 5 \times 33$, $660 \times 5 \times 66$, $660 \times 10 \times 66$ элементарных ГЦК-ячеек, которые соответствуют пластинам толщиной $\delta = 62, 120, 240 \text{ \AA}$.

Здесь следует сделать ряд замечаний.

1. В формулу (2) не был включен безразмерный параметр, равный отношению периода решетки a (или постоянной решетки при симметрии, отличной от кубической) к толщине пластины δ . Это связано с малым значением отношения $a/\delta \leq 5 \cdot 10^{-2}$. С другой стороны, отношение периода решетки a к толщине струи $h < \delta$ может оказаться не малым, поэтому структура атомной решетки может влиять на пространственную структуру струи. Этот вопрос будет рассмотрен ниже на конкретных примерах.

2. Не учтенный нами безразмерный параметр, равный отношению среднего размера зерна структуры φ к толщине пластины δ , важен только при соударении макропластин, особенно имеющих текстуру с большими размерами зерен. Действительно, при $R \approx h = \delta \sin^2(\gamma/2)$, равном или меньшем размера φ , в экспериментах [9] зарегистрирован сдвиг начала волнообразования в сторону больших значений скорости точки контакта. Это интересное наблюдение

требует отдельного рассмотрения, выходящего за рамки настоящей работы.

3. Ниже, кроме симметричного соударения медных пластин, рассматриваются задачи о несимметричном соударении медных пластин и соударении медной и алюминиевой пластин. В этих случаях в постановке задач будут внесены изменения.

Для расчета скоростей и координат атомов использовался метод молекулярной динамики [6]. Движение атомов описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями Гамильтона [6]:

$$\frac{dp_{i\alpha}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i^\alpha}, \quad \frac{dx_i^\alpha}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{i\alpha}}, \quad H = K + V(x_i^\alpha), \quad (3)$$

$$K = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \frac{mv_{i\alpha} v_{i\alpha}}{2}, \quad p_{i\alpha} = mv_{i\alpha}.$$

В качестве потенциала межатомного взаимодействия в данной работе использовались многочастичные потенциалы [7, 8], рассчитанные методом погруженного атома. Система обыкновенных дифференциальных уравнений движения атомов (3) решалась численно по схеме Верлета [6]. Шаг интегрирования по времени был равен $\tau = 0.001 \text{ пс}$. Решением уравнений (3) на каждом временном слое были импульсы $p_{\alpha i}$ и координаты x_i^α атомов, по которым находили средние значения компонент тензора напряжений $S_{\alpha\beta}$, давления P и температуры T в наночейке:

$$S_{\alpha\beta} = -\frac{1}{\Omega_c} \sum_{i=1}^{N_c} (mv'_{i\alpha} v'_{i\beta} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_c} F_{ij}^\alpha x_{ij}^\beta),$$

$$P = -\frac{1}{3} S_{\alpha\alpha}, \quad T = \frac{2}{3N_a k_B} \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{mv'_{i\alpha} v'_{i\alpha}}{2}, \quad (4)$$

$$v'_{i\alpha} = v_{i\alpha} - \langle v_{i\alpha} \rangle, \quad \langle v_{i\alpha} \rangle = \frac{1}{N_a} \sum_{i=1}^{N_c} v_{i\alpha},$$

$$F_i^\alpha = \sum_{j \neq i}^{N_b} F_{ij}^\alpha, \quad x_{ij}^\alpha = x_i^\alpha - x_j^\alpha, \quad F_{ij}^\alpha = -\frac{\partial V}{\partial x_{ij}^\alpha}.$$

Здесь k — постоянная Больцмана, Ω_c — объем наночейки, в которой определялись средние значения, N_c — число атомов в наночейке, m — масса. В данной работе $N_c = 1500$.

При вычислении силы F_i^α , действующей на атом i , проводилось суммирование по всем соседям N_b , находящимся внутри сферы, радиус которой равен радиусу обрезания r_c . Формулы (4) можно использовать для вычисления давления, приходящегося на один атом (P_a). Для этого в них нужно положить $N_c = 1$, а объем наноячейки считать равным объему, приходящемуся на один атом, $\Omega_c = \Omega_a$.

В верхней и нижней пластинах введены по три реперных линии, которые состоят из одних и тех же атомов меди, но окрашены различным цветом. Перед соударением реперные линии были ориентированы перпендикулярно верхней и нижней поверхностям пластин. Смещение реперных линий позволяет оценить деформацию материала в пластинах. Между второй и третьей реперными линиями показаны наноячейки, в которых по формулам (4) вычислялись средние напряжение и температура.

Численные расчеты выполнены в два этапа с использованием пакета программ LAMMPS [10] на параллельном вычислительном кластере ИТПМ СО РАН. На первом этапе проводилось нагревание пластин до температуры T_0 , а затем их столкновение под углом γ . Исследовалось соударение «холодных» пластин (начальная температура $T_0 = 2$ К) и пластин с начальной температурой $T_0 = 300$ К. Пластины нагревали до температуры T_0 следующим образом. Сначала атомам приписывались случайные скорости с гауссовым распределением, соответствующим температуре 1 К, затем проводился численный расчет движения атомов длительностью 500 шагов, при этом каждые 10 шагов скорости атомов умножались на постоянный коэффициент, выбранный таким образом, чтобы распределение скоростей в конце расчета соответствовало температуре 2 либо 300 К. На втором этапе к каждому атому нижней пластины прибавлялась скорость v_n , а к атомам верхней пластины — скорость $-v_n$, где v_n направлена перпендикулярно к пластинам (см. рис. 1,а). После этого происходило соударение предварительно нагретых пластин и возникала кумулятивная струя. Результаты расчетов сравнивали с экспериментальными данными.

При проведении экспериментов использовалась методика косоугольного соударения пластин, ускоренных продуктами взрыва взрывчатых веществ [3, 5]. Процесс соударения регистрировался с помощью рентгеновской установки по

экспериментальной схеме, приведенной в работе [5]. Результаты экспериментов оценивались также по сохранным образцам.

Ниже приведены результаты расчетов и данные экспериментов для трех случаев: дозвуковое (по скорости точки контакта) симметричное, дозвуковое несимметричное и сверхзвуковое симметричное соударение пластин.

ДОЗВУКОВОЕ СИММЕТРИЧНОЕ СОУДАРЕНИЕ ПЛАСТИН

На рис. 2, 3 показаны атомные конфигурации, рассчитанные при косом соударении одинаковых медных пластин толщиной $\delta = 240$ Å при различных углах соударения γ и дозвуковой скорости точки контакта ($U < c$). Видно, что при $U = 1.2$ км/с (рис. 2,а) деформация реперных линий в пластинах за точкой контакта незначительна, поэтому пластические деформации малы и кумулятивная струя не образуется. Увеличение скорости точки контакта $U = 2.2$ км/с (рис. 2,б) приводит к возникновению пластических деформаций и образованию кумулятивной струи. Число Рейнольдса в струе $Re \approx 2$ соответствует началу образования струи. Скорость струи близка к скорости точки контакта, а форма струи является волнообразной. Такая форма возникает вследствие колебаний точки контакта в плоскости соударения, в результате которых струя в различные моменты времени истекает под разными углами. Сравнение первой и второй реперных линий показывает, что их форма полностью совпадает. Отсюда следует, что вся деформация происходит вблизи точки контакта, где действуют высокие напряжения (рис. 3,в). На рис. 4,а–в показаны фотографии струи в эксперименте по соударению медных пластин в режиме начала образования струи. Видно, что картины струи в расчете (см. рис. 2,б) и в эксперименте (см. рис. 4,а–в) качественно согласуются между собой. При увеличении скорости точки контакта и угла соударения течение струи выходит на гидродинамический режим (см. рис. 2,в). В этом случае $Re \approx 20$, поэтому вязкими силами в струе можно пренебречь. Безразмерная скорость кумулятивной струи, рассчитанная по первой формуле (1), составила $W/U \approx 1.82$ при $\gamma = 70^\circ$. В численном расчете, результаты которого приведены на рис. 2,в, скорость струи равна $W/U = x_W/x_U \approx 1.8$, где x_W — перемещение вершины струи, x_U — перемещение точки контакта. Отсюда следует,

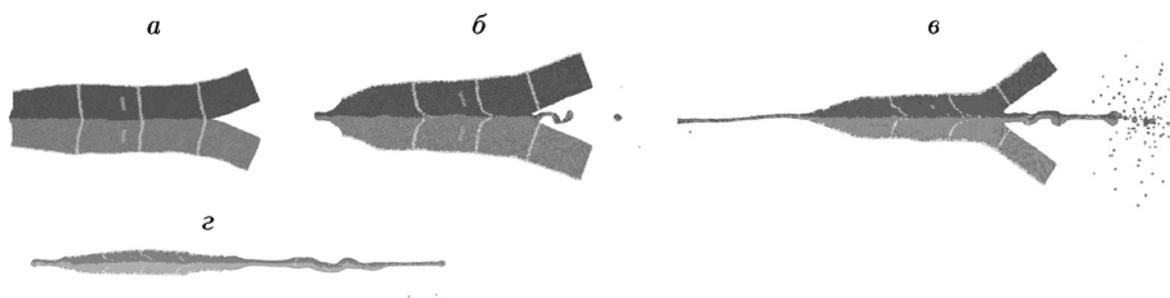


Рис. 2. Атомные конфигурации, рассчитанные при соударении медных пластин одинаковой толщины $\delta_1 = \delta_2 = 240 \text{ \AA}$ при различных параметрах γ , U :

a — $\gamma = 40^\circ$, $U = 1.2 \text{ км/с}$; b — $\gamma = 40^\circ$, $U = 2.2 \text{ км/с}$; c — $\gamma = 70^\circ$, $U = 4 \text{ км/с}$; d — $\gamma = 120^\circ$, $U = 4.2 \text{ км/с}$

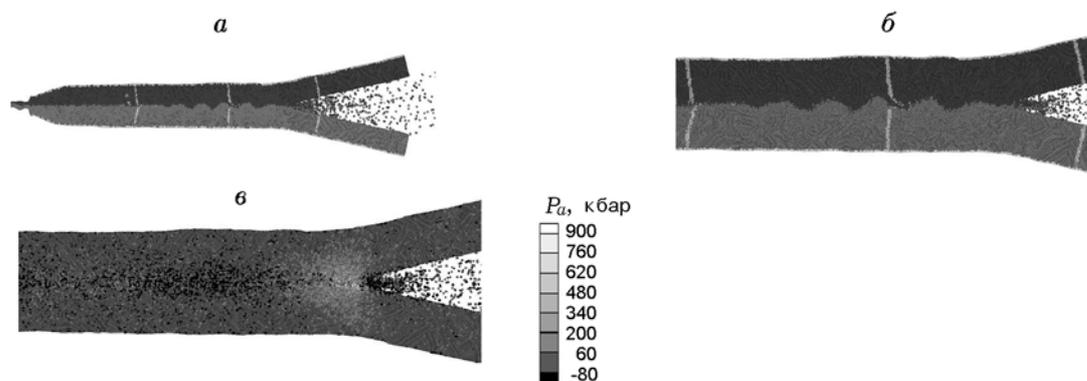


Рис. 3. Атомные конфигурации (a , b) и распределение давления $P_a(x, z)$ (c), рассчитанные при соударении медных пластин одинаковой толщины $\delta_1 = \delta_2 = 240 \text{ \AA}$ при $\gamma = 24^\circ$, $U = 4.2 \text{ км/с}$

что результаты расчета при больших числах Рейнольдса хорошо согласуются с гидродинамической формулой (1). В гидродинамическом режиме экспериментальные данные по скорости струи (рис. 4, z) также хорошо согласуются с формулой (1) [1, 2]. Следует отметить образование облака частиц в головной части кумулятивной струи (см. рис. 2, d), обусловленное нестационарностью начального момента соударения пластин. На стационарной стадии соударения (в системе отсчета, связанной с точкой контакта) максимальное давление по гидродинамической теории $P = 0.5\rho U^2 \cos^2(\gamma/2) \approx 5.46 \cdot 10^5 \text{ бар}$. Из численного расчета в области соударения получается близкое значение $P_a \approx 5.84 \cdot 10^5 \text{ бар}$. При больших углах соударения ($\gamma > 90^\circ$) возникает режим «обратной» кумуляции [11]. На рис. 2, d показана картина течения, рассчитанная при $\gamma = 120^\circ$. В этом случае толщина струи увеличивается, а после соударения образуется компактное тело, которое перемещается вправо (см. рис. 2, z).

ВОЛНООБРАЗОВАНИЕ ПРИ СОУДАРЕНИИ ПЛАСТИН

При дозвуковом соударении пластин возможно образование волн на поверхности контакта сталкивающихся пластин [1–4, 12, 13]. На рис. 3 показаны результаты расчета соударения пластин с образованием волн в окрестности точки контакта. Аналогичная картина образования волн наблюдается в эксперименте при соударении алюминиевой и свинцовой пластин (рис. 4, d, e). В данном случае реализуется следующий механизм волнообразования. За счет начальных возмущений (в геометрических размерах пластин либо скорости их соударения [14]) в точку растекания струй A могут приходить волны разной амплитуды (см. рис. 1, b). Они вызывают возмущение контактной поверхности в виде углубления (или выпуклости), которое, в свою очередь, ведет к несимметричному взаимодействию струй. Смещение точек растекания верхней и нижней струй и изменение создаваемых ими давлений приво-

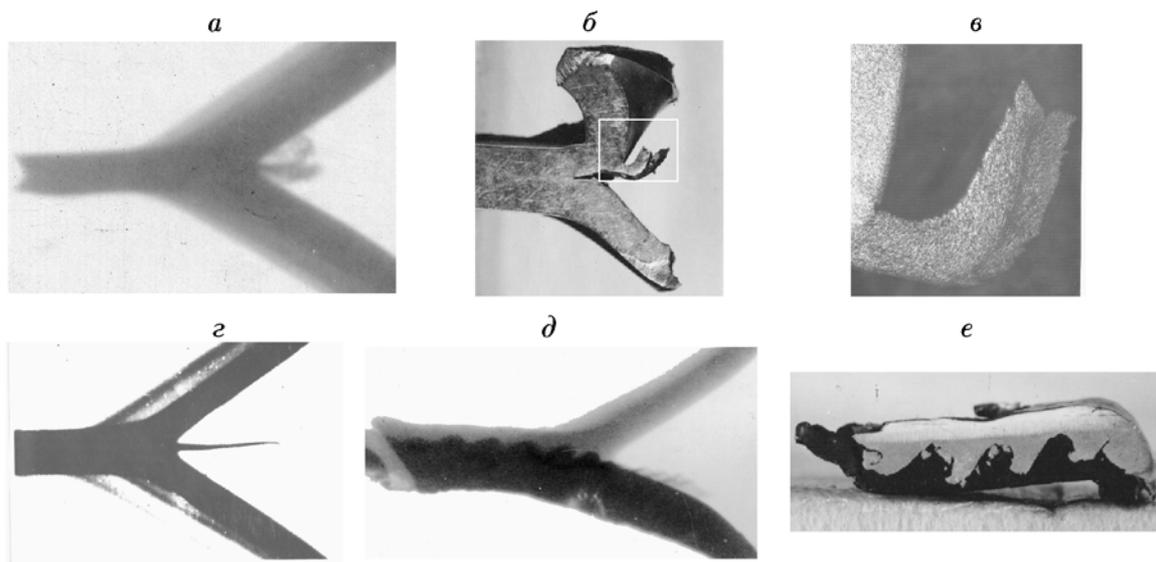


Рис. 4. Результаты эксперимента по соударению пластин:

a — рентгеновский снимок соударения медных пластин с параметрами $\delta_1 = \delta_2 = 7.5$ мм, $\gamma = 70^\circ$, $U = 1.12$ км/с; *b*, *в* — фотографии тех же пластин после соударения; *г* — рентгеновский снимок соударения алюминиевых пластин с параметрами $\delta_1 = \delta_2 = 7$ мм, $\gamma = 70^\circ$, $U = 1.5$ км/с; *д* — рентгеновский снимок соударения алюминиевой ($\delta_1 = 6$ мм) и свинцовой ($\delta_2 = 8$ мм) пластин, $\gamma = 50^\circ$, $U = 0.7$ км/с; *е* — фотография тех же пластин после соударения

дит к возникновению компенсирующего вращающего момента в материале пластин. В результате в области повышенного давления возникают согласованные автоколебания параметров струи и контактной поверхности между пластинами. После вытекания материала из области повышенного давления (в системе координат, связанной с точкой контакта) эти колебания «замораживаются» за счет упругих напряжений в виде волн на контактной поверхности. Вследствие этих колебаний вместо кумулятивной струи образуется облако из атомов и кластеров меди. Длина волны возмущений λ , полученная в численном расчете, оказывается порядка толщины пластины ($\lambda \approx 1.12\delta$), что близко к длине волны, вычисленной по эмпирической формуле Кудинова [3] $\lambda = 26\delta \sin^2(\gamma/2) = 1.12\delta$ при $\gamma = 24^\circ$. На рис. 3, *в* приведено распределение давления в окрестности точки контакта пластин. Видно, что максимальное значение достигается на контактной поверхности, расположенной на переднем склоне бугра, где начинает формироваться новая впадина (см. рис. 3, *б*). Область повышенного давления имеет характерный размер порядка длины волны ($D_p \approx \lambda \approx \delta$), что значительно превышает размер области повышенного давления, полученный по линейной теории

косого дозвукового соударения пластин [3, 16]: $R_p = (2/\pi)\sqrt{1 - (U/c)^2}\delta \sin^2(\gamma/2) \approx 0.015\delta$. Среднее давление в этой области (см. рис. 3, *в*) $P_a \approx 6.5 \cdot 10^5$ бар близко к значению, вычисленному из интеграла Бернулли, $P = 0.5\rho U^2 \approx 7 \cdot 10^3$ бар. Начальное возмущение в точке растекания может создаваться искусственно ступенькой на поверхности пластины [15, 16] либо проволочкой, помещаемой между сталкивающимися пластинами [17]. При соударении медной и алюминиевой пластин наблюдается волнообразование на контактной поверхности медь — алюминий (рис. 5, *г*, *д*). Отметим, что развитие возмущений и образование волн происходят только в области повышенного давления. Оценка роста возмущений за счет неустойчивости Кельвина — Гельмгольца в линейном приближении показывает, что за время пребывания в области повышенного давления амплитуда волны не может увеличиться больше чем в e раз. Учитывая малую амплитуду начальных возмущений поверхности пластины (амплитуда возмущений много меньше толщины пластин), кажется маловероятным развитие возмущений в ней за счет неустойчивости Кельвина — Гельмгольца [18].

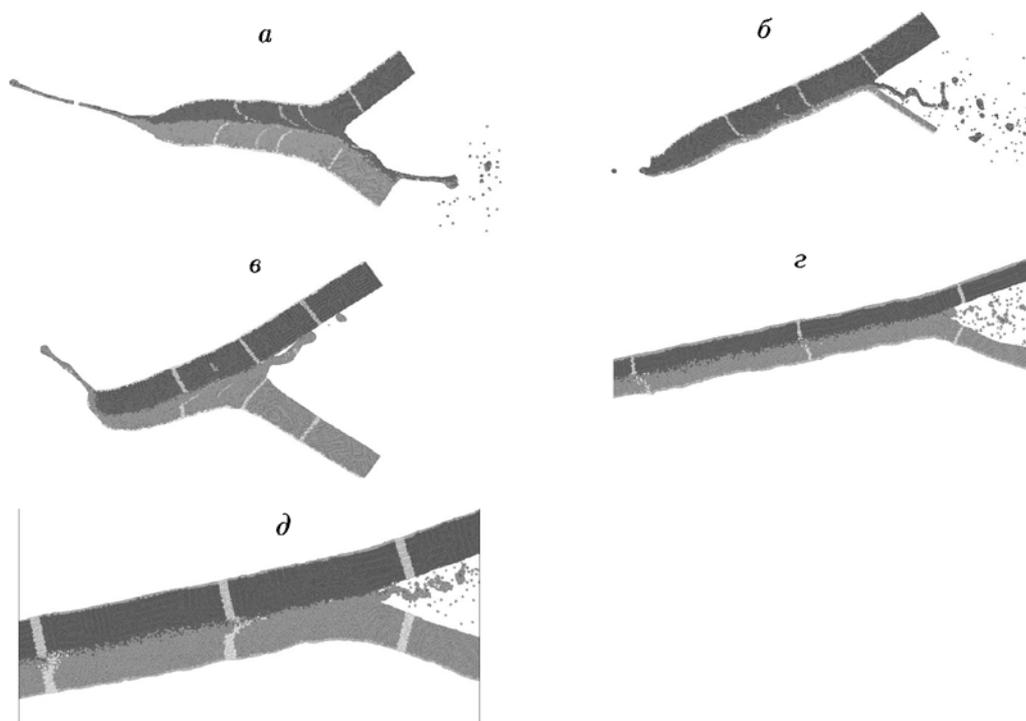


Рис. 5. Атомные конфигурации, рассчитанные при несимметричном соударении пластин при различных параметрах:

a — $\gamma = 50^\circ$, нижняя пластина — Cu, $\delta_1 = 240 \text{ \AA}$, $v_{n1} = 2 \text{ км/с}$, верхняя пластина — Cu, $\delta_2 = 240 \text{ \AA}$, $v_{n2} = 2.44 \text{ км/с}$; *б* — $\gamma = 50^\circ$, $v_{n1} = v_{n2}$, $U = 4 \text{ км/с}$, нижняя пластина — Cu, $\delta_1 = 50 \text{ \AA}$, верхняя пластина — Cu, $\delta_2 = 240 \text{ \AA}$; *в* — $\gamma = 70^\circ$, $v_{n1} = v_{n2}$, $U = 2 \text{ км/с}$, нижняя пластина — Al, $\delta_1 = 240 \text{ \AA}$, верхняя пластина — Cu, $\delta_2 = 240 \text{ \AA}$; *г* — $\gamma = 40^\circ$, $v_{n1} = v_{n2}$, $U = 3.23 \text{ км/с}$, нижняя пластина — Al, $\delta_1 = 60 \text{ \AA}$, верхняя пластина — Cu, $\delta_2 = 60 \text{ \AA}$; *д* — $\gamma = 40^\circ$, $v_{n1} = v_{n2}$, $U = 3.23 \text{ км/с}$, нижняя пластина — Al, $\delta_1 = 120 \text{ \AA}$, верхняя пластина — Cu, $\delta_2 = 120 \text{ \AA}$

ДОЗВУКОВОЕ НЕСИММЕТРИЧНОЕ СОУДАРЕНИЕ ПЛАСТИН

На рис. 5 показаны атомные конфигурации, рассчитанные при несимметричном соударении пластин. Рис. 5, *a* соответствует случаю, когда скорость соударения верхней медной пластины v_{n2} (скорость по нормали к пластине) была на 440 м/с больше скорости нижней медной пластины v_{n1} . В результате соударения возникает кумулятивная струя, которая прижимается к нижней пластине. Аналогичный эффект наблюдался в эксперименте по соударению медных пластин с разными скоростями (рис. 6, *a*). Отклонение струи вниз связано с тем, что поперечный импульс верхней пластины больше, чем у нижней пластины. Максимальный угол отклонения определялся из условия касания струи и нижней пластины, после чего происходило отражение струи от нижней пластины. Подобная картина движения струи наблюдалась в случае соударения двух мед-

ных пластин, движущихся с одинаковой скоростью ($v_{n2} = v_{n1}$), но имеющих разную толщину ($\delta_1 = 50 \text{ \AA}$, $\delta_2 = 240 \text{ \AA}$, рис. 5, *б*).

На рис. 5, *в* приведены результаты расчета, а на рис. 5, *б* — результаты эксперимента по соударению летящих с одинаковой скоростью медной и алюминиевой пластины. Видно, что картины течения в расчете и эксперименте подобны. Перед точкой контакта возникает струя из алюминия, которая движется вдоль медной пластины. Это связано с тем, что предел упругости в алюминии в два-три раза меньше, чем в меди, в результате соударения алюминиевая пластина растекается по поверхности медной пластины.

На рис. 5, *г*, *д* приведены результаты исследования влияния толщины пластин (медная и алюминиевая пластины имели одинаковую толщину) на процесс образования струи. Видно, что при малой толщине (см. рис. 5, *г*) вместо струи образуется облако атомов алюминия.

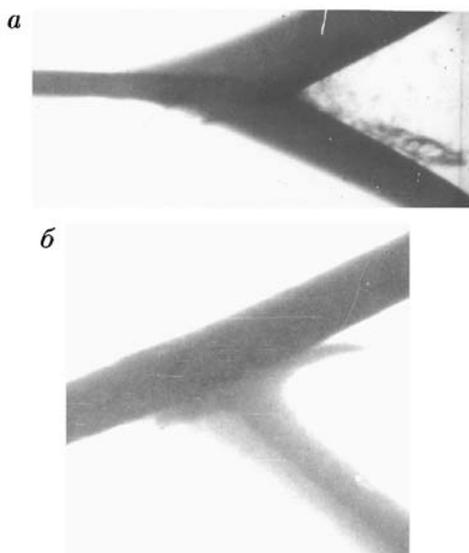


Рис. 6. Рентгеновские снимки соударения пластин:

a — $\gamma = 50^\circ$, нижняя пластина — Cu, $\delta_1 = 3$ мм, $v_{n1} = 1.12$ км/с, верхняя пластина — Cu, $\delta_2 = 3$ мм, $v_{n2} = 1.26$ км/с, *б* — $\gamma = 70^\circ$, нижняя пластина — Al, $\delta_1 = 8$ мм, $v_{n1} = 0.4$ км/с, верхняя пластина — Cu, $\delta_2 = 7.5$ мм, $v_{n2} = 0.21$ км/с

Толщина струи в этом случае $h \approx 3 \text{ \AA}$, вычисленная по второй формуле (1), имеет порядок межатомного расстояния $a = 3.6 \text{ \AA}$, поэтому струя распадается на облако атомов и кластеров меди. При увеличении толщины пластин (см. рис. 5, *д*) соответственно увеличивается толщина струи. Наблюдаются коле-

бания струи и образование волн на контактной поверхности медь — алюминий. Колебания струи связаны с колебаниями точки контакта. На рис. 5, *г, д* хорошо видны волны на контактной поверхности медь — алюминий. Амплитуда и длина этих волн существенно меньше, чем при соударении медных пластин (см. рис. 3). По-видимому, это связано с демпфированием этих волн медной пластиной, пластические деформации которой малы. Возмущения на контактной границе, возникающие при соударении пластин, приводят к большим упругим напряжениям в меди, которые подавляют эти возмущения.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СОУДАРЕНИЕ ПЛАСТИН

Одним из важных вопросов является влияние температуры пластин на процесс их соударения. Рассчитанные конфигурации медных пластин с начальными температурами $T_0 = 2$ и 300 К практически совпадают. Изменение начальной температуры в этом диапазоне не оказывает существенного влияния на процесс соударения пластин и образования струи. На рис. 7, *а, б* приведены зависимости температуры и давления от времени, полученные в расчетах при $T_0 = 2$ и 300 К. В результате соударения пластин температура повышается на 600 К (рис. 7, *а*), поэтому расплавления материала в данном случае не происходит. Максимальное давление в пластинах не зависит от их начальной температуры (рис. 7, *б*). Быстрый

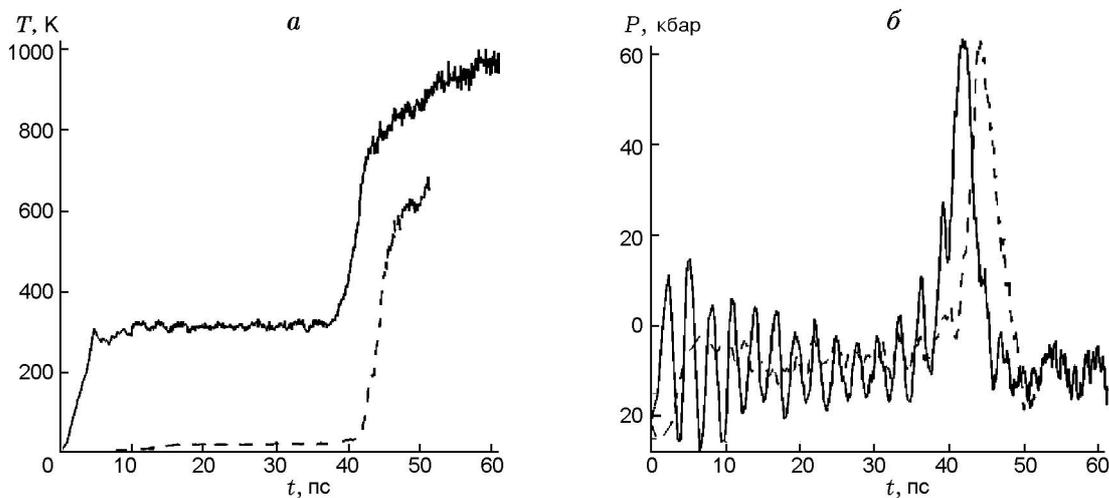


Рис. 7. Распределения температуры (*а*, сплошная линия — $T_0 = 300$ К, штриховая — $T_0 = 2$ К) и давления (*б*) во времени (сплошная линия — $T_0 = 300$ К, штриховая — $T_0 = 2$ К)

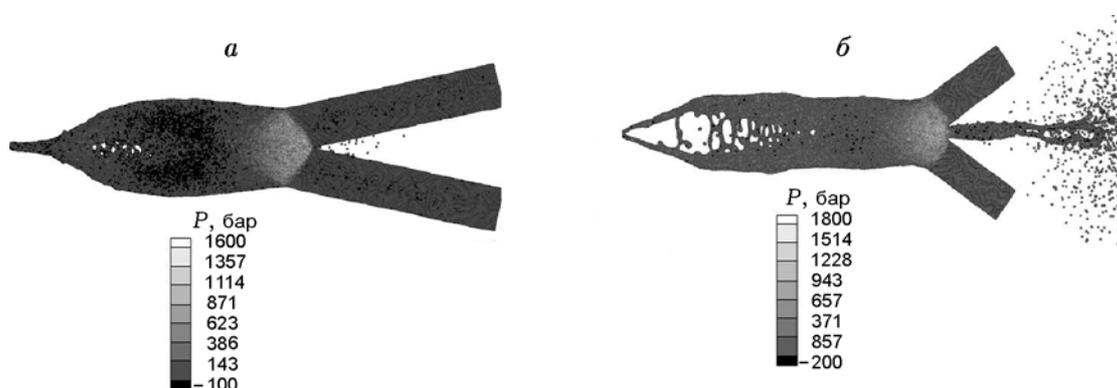


Рис. 8. Распределения давления в пластинах $P_a(x, z)$, рассчитанные при сверхзвуковом соударении медных пластин одинаковой толщины $\delta_1 = \delta_2 = 240 \text{ \AA}$ ($U = 6.8 \text{ км/с}$, $\gamma = 24^\circ$ (а), $\gamma = 70^\circ$ (б))

нагрев пластины перед соударением до температуры $T_0 = 300 \text{ К}$ приводит к тепловому расширению и возникновению колебаний давления. С течением времени эти колебания затухают под действием сил вязкости и не оказывают существенного влияния на процесс соударения пластин. Сделаем одно замечание, связанное с расчетом температуры. При вычислении температуры методом МД учитывается вклад только фононов в теплопроводность металла. Основной же вклад в теплопроводность металла вносит движение электронов, которые подчиняются статистике Ферми [19]. Электронная теплопроводность на два порядка превосходит фононную. Поэтому расчет распределения температуры по толщине пластины методом МД проводится фактически в адиабатическом приближении и может несколько отличаться от соответствующего распределения в реальном металле. В то же время средние (по толщине пластины) температуры в расчете методом МД (см. рис. 7,а) и в эксперименте отличаются незначительно, так как она определяется диссипативными процессами в материале пластин. Отметим, что расчет соударения пластин при $T_0 = 2 \text{ К}$ носит методический, модельный характер. При температуре кристалла, стремящейся к нулю, описание колебаний атомов в решетке в рамках классической механики, некорректно. В частности, за счет квантовых эффектов теплоемкость меди при $T_0 = 2 \text{ К}$ стремится к нулю [19].

СВЕРХЗВУКОВОЕ СОУДАРЕНИЕ ПЛАСТИН

Рассмотрим соударение пластин, когда

скорость точки их контакта больше продольной скорости звука (в меди $c = 4700 \text{ м/с}$). В этом случае в нижней и верхней пластинах возникают две косые ударные волны, взаимодействующие между собой. На основе численных расчетов в рамках модели сплошной среды и анализа ударной поляры было показано, что для металлов [20] при малых углах соударения $\gamma < 20 \div 40^\circ$ происходит регулярное взаимодействие ударных волн и отсутствует кумулятивная струя. При больших углах возможно образование кумулятивной струи [20].

На рис. 8 приведены атомные конфигурации и распределения давления, полученные в результате расчета методом МД сверхзвукового ($M = U/c = 1.43$) соударения пластин под углами $\gamma = 24^\circ$ и 70° . В первом случае (рис. 8,а) из точки контакта выходят две косые ударные волны (регулярное взаимодействие ударных волн). Втекающие в точку контакта струи (в системе отсчета, связанной с точкой контакта) разворачиваются в ударных волнах, поэтому кумулятивная струя не возникает. Во втором случае (рис. 8,б) ударные волны отходят от точки контакта и смещаются вверх по потоку. Видно, что фронт каждой ударной волны перпендикулярен к натекающему потоку, а поток за фронтом ударной волны дозвуковой (согласно теореме Цемплена). Поэтому в точке контакта происходит соударение дозвуковых струй, при котором возможно образование кумулятивной струи (см. рис. 8,б). Вследствие нестационарных эффектов вершина струи распадается на облако атомов, а сама струя расщепляется на две струи. В процессе происходит разрушение материала по кон-

тактной поверхности, что согласуется с экспериментальным наблюдением отсутствия сварки взрывом при сверхзвуковом соударении пластин [1, 3].

ОЦЕНКА ВЯЗКОСТИ МЕДИ

Вязкость металлов сильно зависит от скорости деформации. Увеличение скорости деформации от 10 до 10^7 с^{-1} приводит к уменьшению вязкости стали и алюминия от 10^6 до $10^3 \text{ Па} \cdot \text{с}$ [5]. При МД-моделировании соударения пластин, размеры которых составляют несколько сотен нанометров, реализуется высокая скорость деформации $\dot{\epsilon} \approx U/R \approx 10^{10} \div 10^{12} \text{ с}^{-1}$.

Используя результаты расчета методом МД, оценим при $\dot{\epsilon} = 10^{10} \div 10^{11} \text{ с}^{-1}$ вязкость меди по величине наклона реперных ли-

ний [3, 21] и из условия возникновения кумулятивной струи [5]. На рис. 9, *a* показан результат расчета соударения пластин, в которых реализуется пластическое деформирование, но кумулятивная струя не возникает. По деформации реперных линий за точкой контакта видно, что атомы, расположенные вблизи поверхности контакта пластин ($z = 0$), смещаются в направлении точки контакта на большие расстояния по сравнению с атомами, находящимися вдали от поверхности контакта. Это означает присутствие в пластинах затопленной струи, импульс которой уравнивается вязкими напряжениями [5]. Из рис. 9, *a* определяем смещение атомов, расположенных на поверхности контакта пластин относительно атомов, находящихся на внешней поверхности пластин ($z = \delta$): $\Delta x_0 = x(z = 0) - x(z = \delta) \approx 85 \text{ \AA}$. Предполагая, что смещение реперных линий вдоль оси x описывается параболическим профилем [21] $\Delta x = \rho U \sin^2(\gamma/2)(z - \delta)^2/4\eta$, находим вязкость меди $\eta = \rho U \delta^2 \sin^2(\gamma/2)/(4\Delta x_0) \approx 2.58 \times 10^{-2} \text{ Па} \cdot \text{с}$ при скорости деформации $\dot{\epsilon} \approx U/\delta \approx 6.5 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$. Используя это значение вязкости, оценим касательное напряжение в пластине $S_{xz} \approx \eta U \cos(\gamma/2)/\delta \approx 1.56 \cdot 10^4 \text{ бар}$. Оно близко к максимальному касательному напряжению, полученному в МД-расчете (рис. 9, *б*), $S_{xz} \approx 1.6 \cdot 10^4 \text{ бар}$. Оценим вязкость из условия возникновения кумулятивной струи. Согласно [5] струя возникает в случае, когда ее импульс больше либо равен тормозящему импульсу вязких напряжений:

$$2\rho\delta U_1^2 \sin^2(\gamma/2) = 4\eta U_1(1 - \sin(\gamma/2)), \quad (5)$$

$$U_1 = U_* \cos(\gamma/2),$$

где U_* — критическая скорость точки контакта возникновения струи. В численных расчетах величина U_* определялась из условия равенства нулю скорости струи в системе отсчета, связанной с точкой контакта $W - U_* = 0$. Переписывая это условие в виде $W/U_* = 1$, из рис. 10 для пластин толщиной $\delta = 240 \text{ \AA}$ находим $U_* = 1.6 \text{ км/с}$. Подставляя это значение в формулу (5), получаем значение вязкости $\eta \approx 2.75 \cdot 10^{-2} \text{ Па} \cdot \text{с}$, близкое к найденному ранее по наклону реперных линий (отличие соответствующих значений η порядка 6 %). Данная оценка вязкости меди согласуется с результатами работы [22], в которой методом МД рассчитано значение вязкости расплава меди $\eta \approx 4 \cdot 10^{-3} \text{ Па} \cdot \text{с}$ при скорости деформации

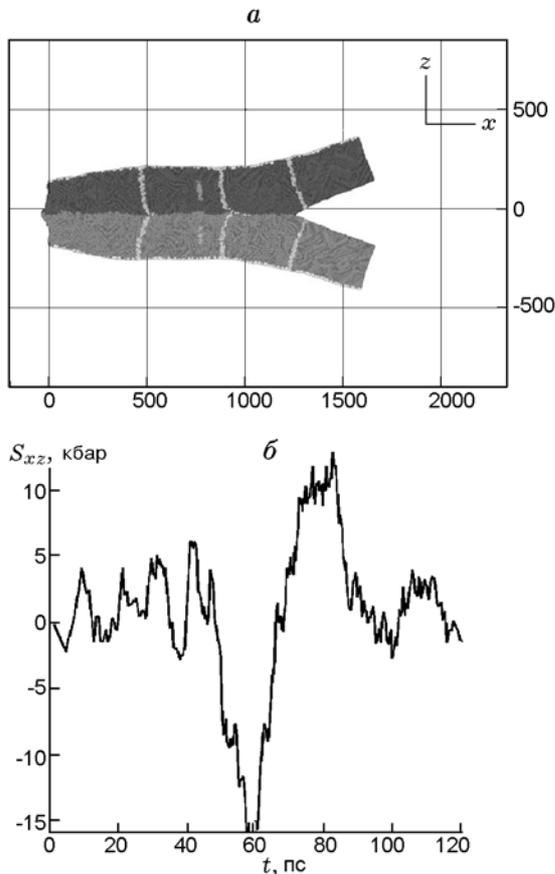


Рис. 9. Атомная конфигурация (*a*), рассчитанная при дозвуковом соударении медных пластин одинаковой толщины $\delta_1 = \delta_2 = 240 \text{ \AA}$ ($\gamma = 40^\circ$, $U = 1.56 \text{ км/с}$), и зависимость напряжения S_{xz} от времени t (*б*)

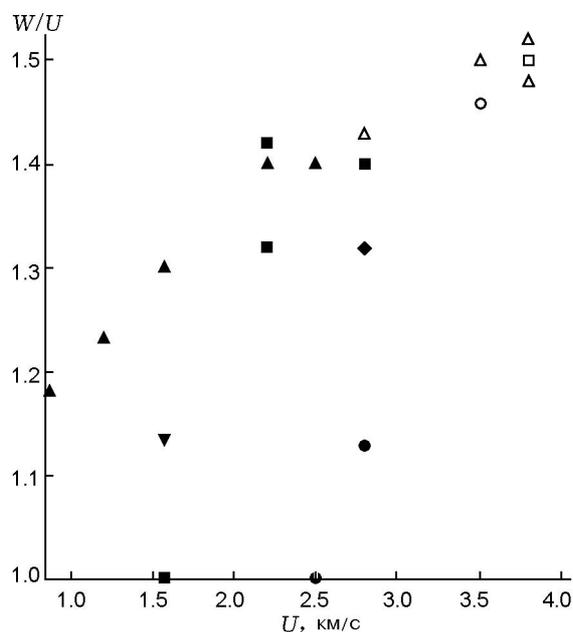


Рис. 10. Зависимость безразмерной скорости кумулятивной струи W/U от скорости точки контакта U при различных толщинах медных пластин:

○, ● — $\delta_1 = \delta_2 = 60 \text{ \AA}$; ◆ — $\delta_1 = \delta_2 = 160 \text{ \AA}$;
 ■, □ — $\delta_1 = \delta_2 = 240 \text{ \AA}$; ▼ — $\delta_1 = \delta_2 = 480 \text{ \AA}$;
 ▲, △ — данные экспериментов [23] при $\delta_1 = \delta_2 = 3.5 \div 4 \text{ мм}$, темные значки соответствуют кумулятивной струе, светлые — облаку частиц (атомов)

$\dot{\epsilon} \approx 10^{10} \text{ с}^{-1}$ в изотермических условиях при постоянной температуре ($T = 1200 \text{ К}$). Однако, это значение на пять порядков меньше, чем вязкость, которая зафиксирована при соударении пластин размером порядка нескольких миллиметров при $\dot{\epsilon} \approx 10^7 \text{ с}^{-1}$ [3, 5].

Проведем количественное сравнение скорости кумулятивной струи W , полученной в МД-расчетах и в экспериментах [23]. На рис. 10 показаны отношения скорости струи к скорости точки контакта W/U при различных толщинах пластин и скоростях соударения. Значения W/U определялись в расчетах и экспериментах [23] по формуле $W/U = x_W/x_U$, где x_W — координата вершины струи, x_U — координата точки контакта (соударение пластин начинается в точке $x = 0$) в момент времени t . Видно некоторое различие значений критической скорости возникновения струи. В работе [23] в экспериментах минимальная критическая скорость возникновения струи составила $U_{* \text{ min}} \approx 0.4 \text{ км/с}$. В численных расчетах величина критической скорости больше $U_{* \text{ min}}$

и зависит от толщины соударяющихся пластин — $U_* \approx 1.6 \text{ км/с}$ при $\delta = 240 \text{ \AA}$ и $U_* \approx 2.5 \text{ км/с}$ при $\delta = 60 \text{ \AA}$. Отмеченное различие U_* и $U_{* \text{ min}}$ связано с тем, что в экспериментах $U_{* \text{ min}}$ определяется из условия возникновения пластического течения: $S_{\alpha\beta} \approx Y_0 \approx P = 0.5\rho U_{* \text{ min}}^2 \cos^2(\gamma/2) \approx 7 \cdot 10^3 \text{ бар}$. В численных расчетах возникновение струи определяется вязкими напряжениями (5), величина которых более чем в два раза превышает предел текучести (см. рис. 9, б) $S_{\alpha\beta} \geq 2Y_0$, поэтому в численных расчетах $U_* > U_{* \text{ min}}$. Наблюдаемая зависимость критической скорости U_* от толщины пластины δ следует из уравнения (5): $U_* \approx \eta/(\delta\rho \sin^2(\gamma/2))$. При увеличении скорости точки контакта U относительно критической скорости U_* наблюдается совпадение рассчитанной и измеренной в эксперименте скоростей струи W (см. рис. 10). Отметим, что в [23] как в экспериментах, так и в численных расчетах при приближении скорости струи U к критической величине U_* кумулятивная струя распадается на облако частиц. Авторы работы [23] связывали этот эффект с влиянием шероховатости пластин и размера зерна структуры φ , а в численных расчетах разрушение струи считали обусловленным влиянием атомарной структуры материала пластин.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены результаты математического моделирования методом молекулярной динамики и экспериментального исследования косоугольного соударения пластин в широком диапазоне скоростей, включающих дозвуковые (по скорости точки контакта) течения с образованием кумулятивных струй и волн на контактной поверхности, а также сверхзвуковые течения. Показано, что результаты расчетов методом МД качественно верно описывают основные экспериментальные закономерности, имеющие место при косоугольном соударении макроскопических пластин в широком диапазоне изменения скоростей точки контакта. Коротко перечислим основные закономерности, полученные в расчетах. При малых значениях скорости точки контакта металлы проявляют упругие свойства без остаточных деформаций и кумулятивной струи. Подтверждено существование критического значения числа Рейнольдса ($Re \approx 2$), при котором происходит зарождение кумулятивной струи [5]. При больших чис-

лах Рейнольдса значение скорости кумулятивной струи, рассчитанной по модели МД, близко к значению скорости струи, определенной по модели идеальной жидкости. Показано, что МД-расчет описывает режимы с образованием волн на контактной поверхности. При соударении пластин со сверхзвуковой скоростью точки контакта появляются ударные волны. При малом угле соударения $\gamma = 24^\circ$ отраженные ударные волны выходят из точки контакта, поэтому кумулятивная струя отсутствует. При большом угле соударения $\gamma = 70^\circ$ отраженные ударные волны смещаются из точки контакта вверх по потоку в налетающие пластины, что приводит к возникновению кумулятивной струи. Расчеты по МД и эксперименты показали, что при соударении одинаковых пластин с разными скоростями происходит отклонение струи в направлении более медленной пластины. Соударение пластин разной толщины с одинаковыми скоростями приводит к отклонению струи в сторону более тонкой пластины. Соударение медной и алюминиевой пластин приводит в эксперименте и в расчете к образованию струи из алюминия и ее движению вдоль поверхности медной пластины. В расчетах определены значения динамического коэффициента вязкости меди при скоростях деформирования 10^{11} с^{-1} , которые близки к соответствующим значениям для расплава меди [22]. Впервые в расчетах обнаружены режимы соударения, при которых вследствие дискретной атомной структуры пластин вместо кумулятивной струи образуется облако, состоящее из атомов и кластеров.

Авторы выражают большую благодарность академику С. К. Годунову за многочисленные стимулирующие обсуждения и О. В. Белаю за помощь при проведении численных расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Проблемы гидродинамики и их математические модели. — М.: Наука, 1973.
2. Физика взрыва / Ф. А. Баум, Л. П. Орленко, К. П. Станюкович, В. П. Челышев, Б. И. Шехтер. — М.: Наука, 1975.
3. Дерibas А. А. Физика упрочнения и сварки взрывом. — Новосибирск: Наука, 1980.
4. Explosive Welding of Metals and Its Application / В. Crossland (Ed.). — Oxford: Clarendon Press, 1982.
5. Годунов С. К., Дерibas А. А., Мали В. И. О влиянии вязкости материала на процесс образования струй при соударениях металлических пластин // Физика горения и взрыва. — 1975. — Т. 11, № 1. — С. 3–18.
6. Computer simulation of liquids / М. P. Allen, D. J. Tildesley. — Oxford: Univ. Press, 1987.
7. Adams J. B., Foiles S. M., Wolfer W. G. Self-diffusion and impurity diffusion of FCC metals using the 5-frequency model and the embedded atom method // J. Mater. Res. — 1989. — V. 4. — P. 102–112.
8. Karolewski M. A. Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals // Radiation Effects and Defects in Solids. — 2001. — V. 153. — P. 229–235.
9. Бондарь М. П., Дерibas А. А., Мали В. И., Симонов В. А. Влияние размера зерна на начало процесса волнообразования при сварке взрывом // Физика горения и взрыва. — 1976. — Т. 12, № 5. — С. 795–799.
10. Plimpton S. J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. — 1995. — V. 117. — P. 1–9.
11. Титов В. М. Возможные режимы гидродинамической кумуляции при схлопывании облицовок // Докл. АН СССР. — 1979. — Т. 247, № 5. — С. 1082–1084.
12. Абрахамсон Г. Р. Остаточные периодические деформации поверхности под действием перемещающейся струи // Тр. Амер. о-ва инж.-мех. Сер. Е. Прикладная механика. — 1961. — Т. 28, № 4. — С. 45–55.
13. Bahrani A. S., Black T. I., Crossland B. The mechanics of wave formation in explosive welding // Proc. Roy. Soc. — 1967. — V. A296, N 1445. — P. 123–136.
14. Kinelovsky C. A., Mali V. I., Trishin Yu. A. Shear flow instability upon a nonsymmetric collision of plates // Impact Loading and Dynamic Behaviors of Materials / С. Y. Chiem, Н.-D. Kunze, L. W. Meyer (Eds). — DGM Informationsgesellschaft Verlag, Germany, 1988. — V. 2. — P. 729–736.
15. Годунов С. К., Дерibas А. А., Козин Н. С. Волнообразование при сварке взрывом // ПМТФ. — 1971. — № 3. — С. 63–72.
16. Godunov S., Deribas A., Zabrodin A., Kosin N. Hydrodynamic effects in colling solids // J. Computer. Phys. — 1970. — V. 5, N 3. — P. 517–539.
17. Пай В. В., Лукьянов Я. Л., Кузьмин Г. Е., Яковлев И. В. Волнообразование при высокоскоростном симметричном соударении металлических пластин // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 5. — С. 132–137.
18. Robinson J. A. A fluid model of impact welding // 5th Intern. Conf. on High Energy Rate Fabrications. — Denver, Colorado, USA, 1975. — P. 4.16.1–4.16.12.

19. **Анималу А.** Квантовая теория кристаллических твердых тел. — М.: Мир, 1981.
20. **Chou P. C., Carleone J., Karpp R.** Criteria for jet formation from impinging shells and plates // J. Appl. Phys. — 1976. — V. 47, N 7. — P. 2975–2981.
21. **Годунов С. К., Дерибас А. А., Захаренко И. Д., Мали В. И.** Исследование вязкости металлов при высокоскоростных соударениях // Физика горения и взрыва. — 1971. — Т. 7, № 1. — С. 135–142.
22. **Desgrandes C., Delhomelle J.** Rheology of liquid metals: nonequilibrium molecular dynamics simulations at experimentally accessible shear rates // J. Chem. Phys. — 2008. — V. 128. — P. 084506-1–084506-6.
23. **Дерибас А. А., Захаренко И. Д.** О поверхностных эффектах при косых соударениях металлических пластин // Физика горения и взрыва. — 1974. — Т. 10, № 3. — С. 409–421.

Поступила в редакцию 20/V 2011 г.
