

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА САМОЗАТАЧИВАНИЯ УДАРНИКА ИЗ W ПРИ ПРОНИКАНИИ В МИШЕНЬ ИЗ Fe

М. В. Ветчинников, М. А. Демина, А. Н. Анисимов, С. А. Грушин, А. Г. Кечин,  
В. П. Фомин, В. А. Дегтярев

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Приведены результаты МД моделирования проникания различных ударников из вольфрама в мишень из железа. Моделирование проводилось как для монокристаллических, так и поликристаллических образцов. По результатам расчетов видно, что процесс самозатачивания для ударников из вольфрама имеет пороговый характер и начинается со скорости  $\sim 2,1$  км/с. Приведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Расчеты проведены с помощью комплекса классической молекулярной динамики MoDyS, развиваемого в ИТМФ. В моделировании использовались многочастичные потенциалы погружного типа (EAM).

*Ключевые слова:* молекулярная динамика, вольфрам, железо, пробитие, ударник, мишень, самозатачивание, адиабатические полосы сдвига, EAM потенциалы, поликристалл.

### Введение

Проблема замены сердечников из обедненного урана (DU – от английского depleted U) на аналогичный по эффективности, но нерадиоактивный материал существует достаточно давно. И одним из первых кандидатов на эту роль был выбран вольфрам и его сплавы (WHA – от английского Wolframium Heavy Alloys).

Эффективность пробития сердечниками из обедненного U связана с эффектом самозатачивания сердечника в процессе прохождения брони, позволяющим ему проникать глубже [1].

Динамическое разрушение многих материалов при импульсных нагружениях обычно проявляется в виде сдвигов материала, возникающих при образовании больших локальных градиентов скоростей. Во многих случаях эти большие сдвиговые деформации появляются в очень узких зонах, которые назвали адиабатическими полосами сдвига (ASB – Adiabatic Shear Band). Этот механизм разрушения, являющийся результатом развития термомеханической неустойчивости, считается одной из наиболее общих мод разрушения материалов при скорости динамической нагрузки порядка  $10^3$  с<sup>-1</sup> и выше [2]. В последнее время вы-

яснилось, что помимо термической неустойчивости, в некоторых металлах основным механизмом, ответственным за возникновение полос сдвига, является механизм динамической рекристаллизации [2, 3]. Соотношение между двумя источниками зависит не только от металла, но и от хронологии обоих процессов [4].

Для вольфрама эффект самозатачивания имеет пороговый характер, т.е. он возникает при превышении определенной скорости на входе в броню  $\sim 2 \div 2,1$  км/с [5]. Данная скорость является слишком высокой для современных орудий [1]. Поэтому во многих лабораториях мира, так или иначе связанных с вооружением, ведутся поиски путей к повышению восприимчивости WHA или чистого вольфрама к образованию ASB до уровня, близкого к DU, тем самым снижая необходимую начальную скорость ударника.

Согласно данным из открытых зарубежных научных публикаций исследования в этой области идут по четырем направлениям:

1. Поиск легирующих добавок.
2. Получение ультрамелкозернистых сплавов методами порошковой металлургии с применением электрического тока, химической, микроволновой, плазменной и других обработок.

3. Механическая обработка – изменение структуры, уменьшение размеров и создание направленной ориентации зерен.

4. Создание композитов на основе матриц из металлических стекол [6].

Молекулярная динамика (МД) – уникальный инструмент для исследования динамики поведения вещества на атомарном уровне. При этом для описания процессов разрушения и создания новых межатомных связей, изменения структуры вещества, фазовых переходов и других подобных явлений нужен только потенциал межатомного взаимодействия. Такие потенциалы разрабатываются на основе квантово-механических расчетов и эмпирических данных об основных макроскопических свойствах исследуемого вещества.

Известно, что основные термодинамические параметры веществ (объемный модуль упругости, упругие константы, модуль сдвига, температура плавления, коэффициент теплового расширения, коэффициент фоновой теплопроводности, тензор вязкости) можно получить из результатов МД моделирования, используя при этом всего лишь от нескольких сотен до нескольких тысяч атомов.

Но наиболее интересными являются задачи МД моделирования поведения вещества в динамике при различных нагрузках. В этом случае при моделировании нет необходимости использовать различные феноменологические модели, без которых не может обойтись континуальное моделирование. Понятно, что поведение любой конструкции на макроуровне состоит из совокупности поведения его атомов, чем и занимается МД. Но решать “в лоб” подобные задачи не позволяет современная вычислительная техника. На данный момент при существующих вычислительных мощностях МД моделирование ограничено пространственно-временными рамками, в лучшем случае это микроны и десятки наносекунд.

Одним из способов решения этой проблемы является создание гибридных моделей, использующих в параллельном или последовательном режимах молекулярно-динамический и континуальный подходы.

Напрямую распространить на макроуровень результаты МД моделирования можно, по нашему мнению, только если для моделируемых процессов применимо масштабирование.

В данной работе представлены результаты расчетов проникания различных сердечников из вольфрама в мишень из железа, основанные только на классической МД. Моделирование велось по комплексу MoDyS (классическая молекулярная динамика), развиваемом в ИТМФ.

При моделировании проникания ударника из вольфрама в мишень из железа мы преследовали несколько целей:

1) проверить, может ли эффект самозатачивания проявляться на размерах порядка нескольких тысяч Å;

2) проверить, что эффект самозатачивания имеет пороговый по скорости характер;

3) в соответствии с пунктом 3 направлений исследований убедиться, что механическая обработка (в данном случае аналог равноуглового протягивания) чистого вольфрама повышает его пробивную способность;

4) получить численные характеристики полос сдвига: пространственное распределение компонент тензора напряжений, температуры. Дело в том, что в натуральных баллистических экспериментах невозможно получить данные о ASB, МД в этом отношении – уникальный инструмент, позволяющий получить их в процессе прохождения ударником вещества.

## 1. Постановка численного эксперимента

На рис. 1 представлена плоская схема численного эксперимента.

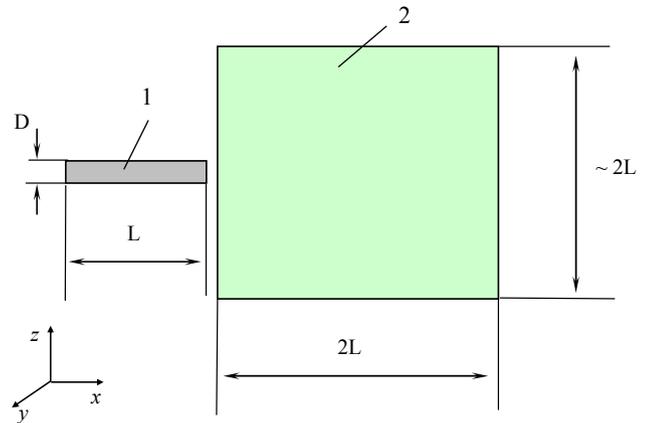


Рис. 1. Двумерная схема численного эксперимента: 1 – ударник из W; 2 – мишень из Fe

В этой работе для вольфрама использовали EAM потенциал Finnis and Sinclair [7], доработанный Ackland and Thetford [8], EAM потенциал для железа брали из работы [9], а методику получения Fe-W потенциала брали из работы [10].

Вольфрам и железо имеют объемно-центрическую кубическую (ОЦК) решетку, постоянная решетки W –  $a_0 = 3,1652$  (Å), Fe –  $a_0 = 2,8553$  (Å).

Поперечный размер мишени определяется из условия отсутствия влияния возмущений из-за пе-

риодических граничных условий, накладываемых на боковые стенки. Временной шаг для интегрирования уравнений движения составляет 1 фс. Начальная температура ударника и мишени 300 К. На первом этапе моделирования проводилась релаксация образца. Время начальной релаксации атомов в решетке 5 пс.

На втором этапе моделирования в момент  $t = 0$  ударнику мгновенно придавалась скорость в направлении оси  $x$ .

У ударника все границы свободные; у мишени на всех боковых гранях – периодические граничные условия, лицевая плоскость – свободные границы, задняя плоскость – также свободные границы.

Во всех задачах, на всех рисунках, показывающих процесс проникания ударника в мишень, красным цветом окрашены атомы железа, синим – атомы вольфрама. Время отсчитывается от момента запуска ударника. Как только массовая скорость ударника сравнивается с массовой скоростью мишени, ударник считается застывшим.

## 2. Моделирование с монокристаллическими образцами

Основная цель первой серии расчетов – получить в численном эксперименте на микроуровне эффект самозатачивания ударника из вольфрама при проникании его в железо. При этом убедиться, что он имеет пороговый по скорости характер.

Начальные данные проведенных расчетов, а также полученные глубины проникания в мишень приведены в табл. 1.

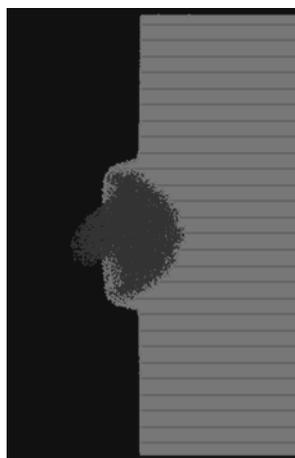
### 2.1. Задачи 1 и 2

Начальные скорости ударников составляли – 1,6 км/с и 1,9 км/с соответственно. На рис. 2, а и 2, б приведены разрезы по плоскости симметрии задачи на момент остановки ударников. В обоих случаях носики ударников имеют классическую грибообразную форму, характерную для пластической деформации ударника [1].

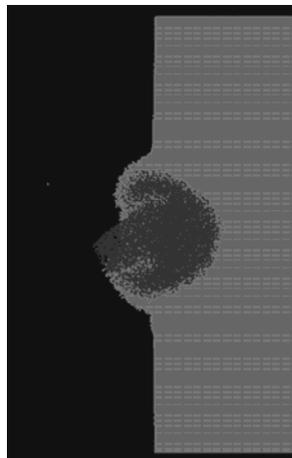
Таблица 1

Начальные данные для моделирования взаимодействия ударника из W с мишенью из Fe, представлены также полученные глубины проникания в мишени

| Номер задачи | Размеры ударника (ОЦК W) ( $a_0$ ) | Общее количество атомов | Размеры мишени (ОЦК Fe) ( $a_0$ ) | Начальная скорость ударника, км/с | Глубина проникания ударника в мишень, Å |
|--------------|------------------------------------|-------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------------|
| 1            | L=200<br>D=20                      | 21 446 456              | 220×220×220                       | 1,6                               | ~ 59                                    |
| 2            | L=200<br>D=20                      | 21 446 456              | 220×220×220                       | 1,9                               | ~ 92                                    |
| 3            | L=200<br>D=20                      | 21 446 456              | 220×220×220                       | 2,1                               | ~ 129                                   |
| 4            | L=400<br>D=40                      | 171 379 824             | 440×440×440                       | 2,1                               | ~ 327                                   |



а



б

Рис. 2. Разрез по центральной плоскости на момент остановки ударников: а – начальная скорость 1,6 км/с ( $t = 49,86$  пс); б – начальная скорость 1,9 км/с ( $t = 67,98$  пс)

## 2.2. Задача 3

Начальная скорость ударника 2,1 км/с. Из рис. 3 видно, что головка цилиндра превратилась в своего рода заостренный наконечник стрелы. Отметим, что мы проводили расчеты со скоростями ударников 2,3 и 2,5 км/с. Во всех случаях формы ударников были подобны представленной на рис. 3.

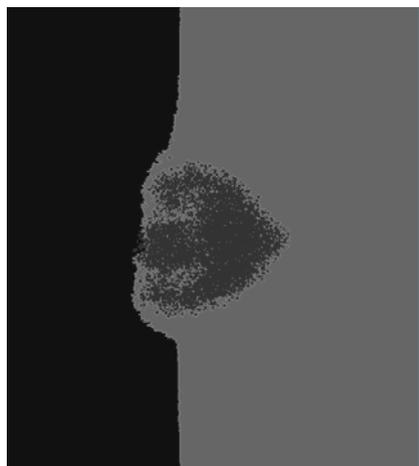


Рис. 3. Разрез по центральной плоскости на момент времени  $t = 67,98$  пс

Отметим, что из рис. 2 и 3 видно, что характер деформации хвостовой части ударников имеет большое сходство. Это связано, скорее всего, с тем фактом, что в этих задачах использовался один и тот же ударник (менялась лишь его скорость) и одна и та же мишень. Таким образом, это, по-видимому, влияние конкретной реализации и детерминированности МД.

## 2.3. Задача 4

В задаче 4 размеры мишени и ударника увеличены в 2 раза по сравнению с задачей 3, соотношение  $L/D = 10$  осталось прежним. На рис. 4 представлен фрагмент разреза задачи по центральной плоскости на момент остановки ударника. Согласно табл. 1 глубина проникания при этом возросла в 2,5 раза по сравнению с задачей 3. Это согласуется с экспериментальными данными и выводами, представленными в книге Rosenberg and Dekel [1], что в задачах с так называемыми эродирующими ударниками (eroding penetrator), к числу которых относятся DU и WHA, геометрический скейлинг отсутствует. Если бы он существовал, то при увеличении размеров ударника, например в 2 раза (при сохранении отношения  $L/D$ ), отношение глубины проникания к длине ударника осталось бы приблизительно прежним.

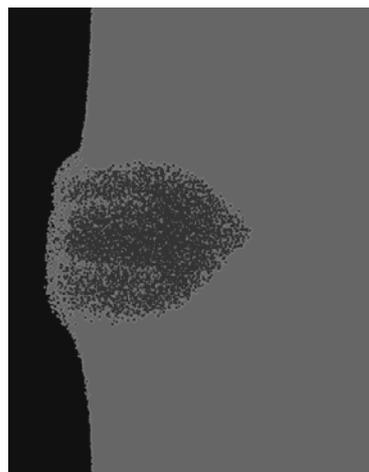


Рис. 4. Разрез по центральной плоскости на момент времени  $t = 86,11$  пс

Согласно [1] степень самозатачиваемости ударника зависит от его размеров. Большой по размерам ударник имеет большую тенденцию к самозатачиваемости, чем меньший, что означает отсутствие геометрического скейлинга для WHA и DU ударников. Так для примера на рис. 5 приведены снимки двух восстановленных после пробивания стали WHA ударников с диаметрами 8 и 16 мм, для которых  $L/D = 10$ .

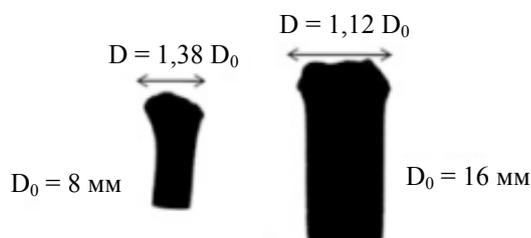


Рис. 5. Формы двух восстановленных WHA ударников различных начальных размеров [1]

Из рис. 6 видно, что диаметр деформированной головы малого стержня на 38 % больше, чем его собственный начальный диаметр, в то время как деформированная голова большого стержня только на 12 % больше, чем его первоначальный диаметр.

## 3. Моделирование с поликристаллическими образцами

В рассматриваемых в данном разделе задачах 5 и 6 и ударник, и мишень являлись поликристаллами. Задача 5 – стартовые размеры. Чтобы по максимуму возможного увеличить размеры зерен в ударнике, был (по сравнению с задачей 4) увели-

чен в два раза диаметр ударника ( $L/D = 5$ ). Поперечные размеры мишени пришлось также увеличить (сравни данные из табл. 1 и 2). В задаче 6 длина ударника была увеличена в 2 раза по сравнению с задачей 5, но при сохранении диаметров ударников одинаковыми, т. е. мы вернулись к соотношению  $L/D = 10$ , как в задаче 4. При этом желательным было бы увеличить толщину мишени, но не позволили вычислительные ресурсы. Количество атомов в задачах 5 и 6 было порядка  $290 \cdot 10^6$  частиц. В планах стояла и следующая задача, где диаметр ударника должен быть увеличен в два раза, чтобы сравниться с задачей 5, т. е.  $L/D = 5$ . Но это потребовало бы еще большего увеличения поперечных и продольных размеров мишени.

Граничные условия на ударнике – везде свободные границы, на мишени – лицевая и обратная – свободные границы, остальные – периодика, начальная скорость ударников – 2,1 км/с.

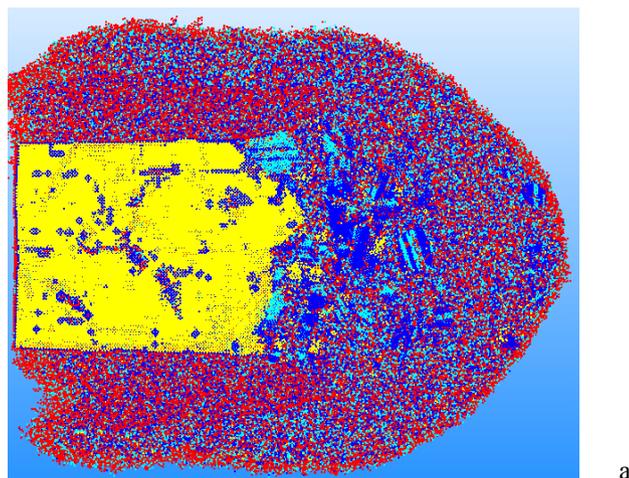
В табл. 3 приведены начальные данные по мишени и ударнику, а также результаты по пробитию мишени для задач 5 и 6.

Таблица 3

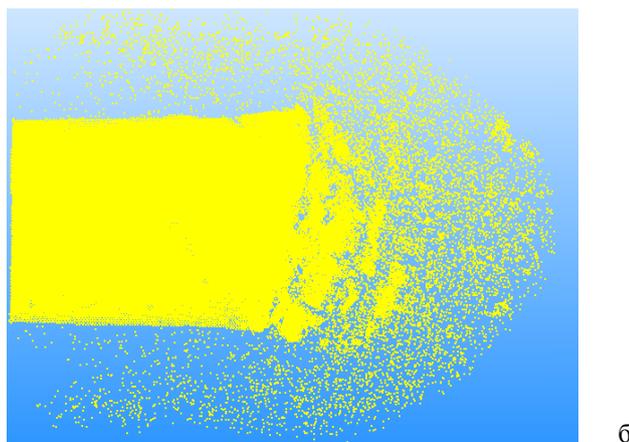
Начальные данные для моделирования взаимодействия ударника из ОЦК W с мишенью из ОЦК Fe

| Но-<br>мер<br>зада-<br>чи | Ударник<br>из поликристал-<br>ла ОЦК W                                  | Мишень<br>из поликристалла ОЦК Fe                                                  |                                                                      |
|---------------------------|-------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|
|                           | Размеры<br>( $a_0$ )                                                    | Размеры<br>( $a_0$ )                                                               | Глубина про-<br>никания<br>ударника в<br>мишень, Å                   |
| 5                         | $L = 400, D = 80,$<br>$\varnothing_{\text{зерна}} \sim 20$<br>320 зерен | $440 \times 600 \times 600$<br>$\varnothing_{\text{зерна}} \sim 20$<br>19800 зерен | 724<br>на момент<br>времени<br>$t = 145$ пс                          |
| 6                         | $L = 800, D = 80,$<br>$\varnothing_{\text{зерна}} \sim 20$<br>810 зерен | $440 \times 600 \times 600$<br>$\varnothing_{\text{зерна}} \sim 20$<br>19800 зерен | Ударник<br>пробил ми-<br>шень на мо-<br>мент времени<br>$t = 177$ пс |

В процессе моделирования производилась обработка на наличие дефектных структур в мишени и ударнике. На рис. 6,а, б представлен один из фрагментов деформированного ударника на момент 75 пс (невозмущенное тело мишени удалено), разрез в плоскости Y. Окрас атомов согласно принадлежности к соответствующей кристаллической решетке: желтый – ОЦК, синий – ГЦК, циан – ГПУ, красный – атомы, не принадлежащие к указанным структурам, дефектные атомы, атомы в расплаве, поверхностные атомы.



а

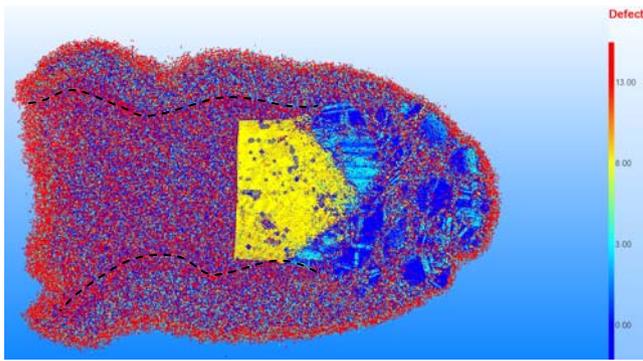


б

Рис. 6. Картина деформации ударника на момент 75 пс: а – ударник со всеми дефектными атомами (как мишени, так и своими); б – только атомы ОЦК W

На рис. 7,а, б приведен вид ударника на момент его остановки в мишени ( $t = 145$  пс). Здесь и далее окрас атомов аналогичен рис. 6. На рис. 7,а приведен вид ударника со всеми отделившимися от него и мишени фрагментами. Пунктиром обозначена внутренняя часть канала, имеющая характерную волнообразную форму, повторяющуюся во всех расчетах. На рис. 7,б приведен вид только ударника и отделившихся от него фрагментов. Головная часть уцелевшего ударника заострена и имеет скосы, составляющие угол приблизительно в  $45^\circ$ , что характерно для формирования сдвиговых полос [1].

На рис. 8 приведена двумерная картина распределения Y-компоненты массовой скорости движения ударника, его осколков и мишени на момент времени 75 пс. Для наглядности приведен контур ударника. Видно, что вынос осколков с головной части ударника происходит под углом к направлению распространения и с очень большой скоростью, порядка 300 – 400 м/с из центральной части к краям.



а



б

Рис. 7. Вид ударника в плоскости  $Y$  на момент остановки (145 пс): а – со всеми его отделившимися остатками и атомами мишени; б – вид частей ударника со структурой ОЦК

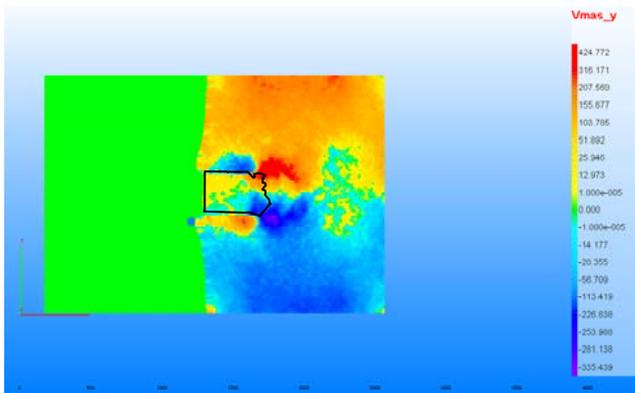


Рис. 8. Двумерная картина распределения  $Y$ -компоненты массовой скорости ударника и мишени на момент 75 пс, разрез по  $Z$  плоскости

В задаче 6, как мы отмечали в начале раздела, длина ударника увеличена в два раза по сравнению с задачей 5, при сохранении диаметров одинаковыми. В данном случае ударник пробил мишень на 177 пс. На рис. 9 приведен вид ударника на этот момент времени. Окрас по принадлежности атомов к ОЦК структуре. Головная часть ударника также имеет характерный заостренный вид.

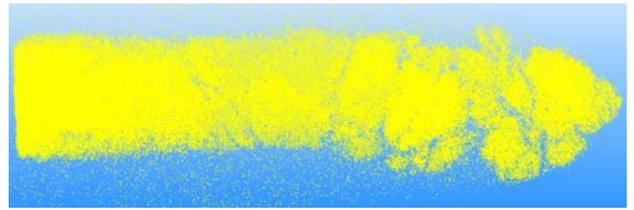


Рис. 9. Вид ударника на момент пробития мишени ( $t = 177$  пс), разрез в плоскости  $Y$

На рис. 10 приведено поведение массовой скорости носовой и хвостовой частей ударника (данные получены по методу Харди [11], усреднение проводилось вдоль центральной оси ударника с носителем  $l = 4 a_0$ ). На рис. 11 приведены полученные из расчета зависимости поведения во времени глубины проникания и длины ударника из  $W$  при проникании его в мишень из Fe. Из этих рисунков видно, что на 177 пс ударник пробил мишень. Массовая скорость на вылете составила чуть меньше 1 км/с.

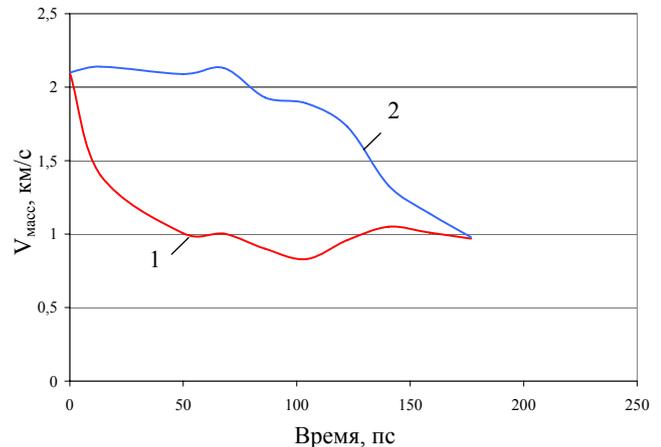


Рис. 10. Поведение во времени массовой скорости носовой (кривая 1) и концевой (кривая 2) частей ударника

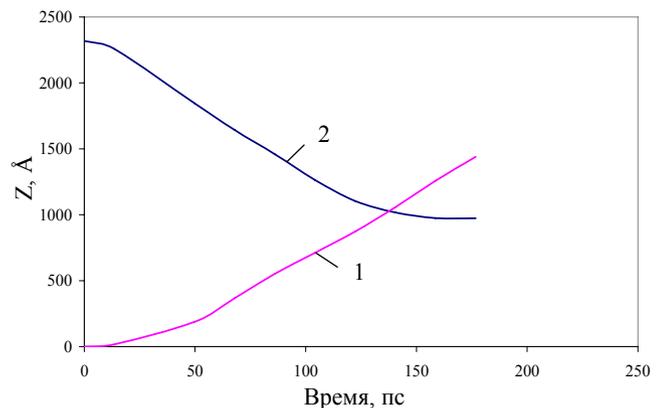


Рис. 11. Поведение во времени глубины проникания (кривая 1) и длины ударника (кривая 2) из  $W$  при проникании его в мишень из Fe

На рис. 12 приведено положение в мишени и форма ударника на момент времени 251 пс, синим цветом окрашены атомы W, красным – атомы Fe

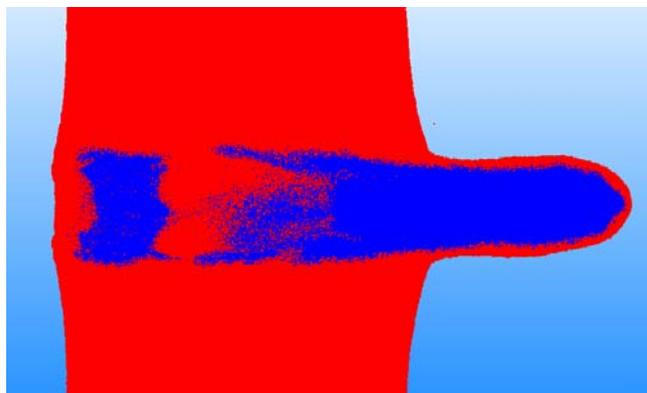


Рис. 12. Положение в мишени и форма ударника на момент времени 251 пс, синим цветом окрашены атомы W, красным – атомы Fe

Для сравнения приведем изображения уцелевших в баллистических экспериментах ударников из различных сплавов [12] (рис. 13). Способность к формированию ASB есть только у 80W–14Cu–6Zn сплава (рис. 13,в). Форма головной части ударников из задач 5 и 6 совпадает с формой на рис. 13,в.

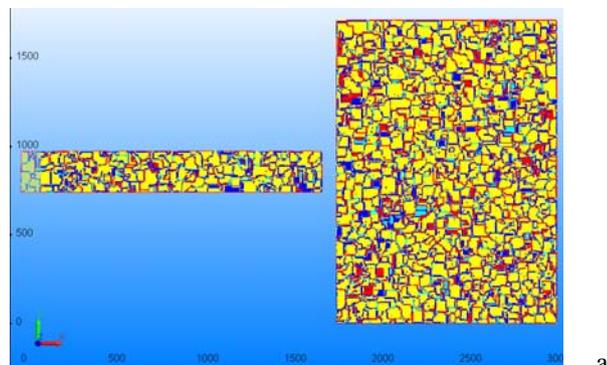


Рис. 13. Остатки ударников, извлеченные из мишеней: а – 35CrMnSiA; б – 90W–7Ni–3Fe; в – 80W–14Cu–6Zn

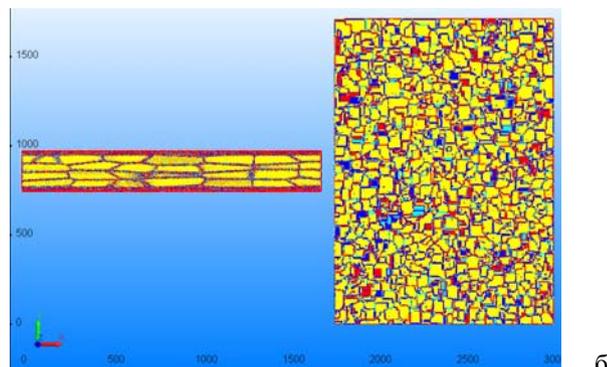
#### 4. Моделирование проникания механически обработанного ударника

Как упоминалось во введении, повысить эффективность пробивания можно с помощью механической обработки уольфрама W к формированию ASB [13]. В данном разделе приведены результаты сравнительного молекулярно-динамического моделирования процесса проникания двух геометрически одинаковых поликристаллических ударников из вольфрама в мишень из железа. Один ударник имел обычные “природные” зерна

(рис. 14,а), а другой – вытянутые вдоль ударника (рис. 14,б). Отношение поперечного размера зерна к продольному в среднем составляло приблизительно 5. Такая структура получается при равноугловом (ЕСАР) или горячем протягивании ударников из чистого вольфрама или его сплавов (рис. 15).



а



б

Рис. 14. Начальная постановка задач для ударника с обычными зёрнами (а) и с вытянутыми по направлению движения (б), разрез по плоскости симметрии задачи

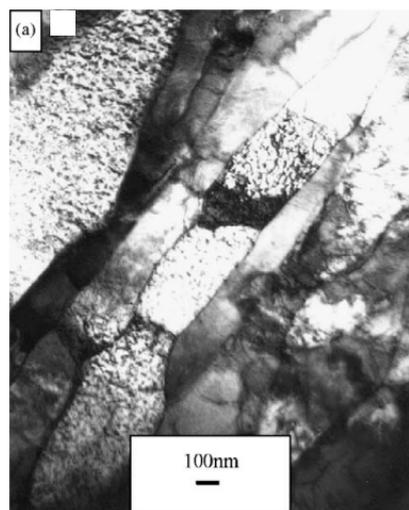


Рис. 15. ТЕМ изображение продольной микроструктуры вольфрамовых частиц в сплаве 93W–4.9Ni–2.1Fe, выдавленном в соотношении 4:1 [14]

Начальные данные для расчетов приведены в табл. 4.

Таблица 4

Начальные данные для моделирования взаимодействия ударников из ОЦК W с мишенью из ОЦК Fe

| Номер расчета | Размеры ударника (ОЦК W) ( $a_0$ )                                                                                    | Размеры мишени (ОЦК Fe) ( $a_0$ )                                       |
|---------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|
| 7             | $L = 600, D = 80$ ,<br>средний $\varnothing$ _зерна $\sim 20$ ,<br>$\sim 400$ зерен                                   | 440×600×600,<br>средний $\varnothing$ _зерна $\sim 20$ ,<br>19800 зерен |
| 8             | $L = 600, D = 80$ ,<br>средний $\varnothing$ _зерна $\sim 16$ ,<br>зерна вытянуты вдоль<br>оси X,<br>$\sim 140$ зерен | 440×600×600,<br>средний $\varnothing$ _зерна $\sim 20$ ,<br>19800 зерен |

Граничные условия идентичны предыдущим задачам. Начальная скорость ударника 2,1 км/с.

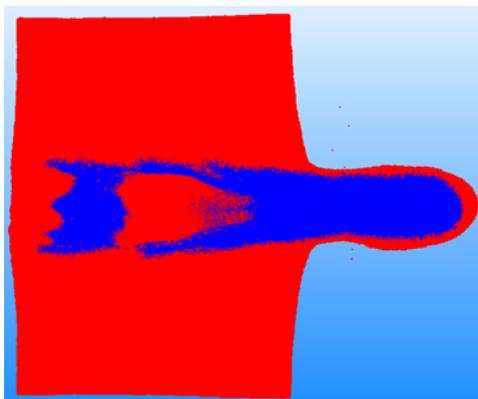
В задаче 7 в моделировании участвовало 290 891 941 атомов (ударник состоял из 4 835 774 атомов), в задаче 8 – 291 637 965 атомов (ударник состоял из 4 899 870 атомов), т. е. ударник с вытянутыми зернами получился на 1,3 % тяжелее.

Оба ударника пробили мишени. Но ударник с вытянутыми зернами (задача 8) на выходе из мишени имел скорость 0,45 км/с, а с обычными зернами – 0,14 км/с.

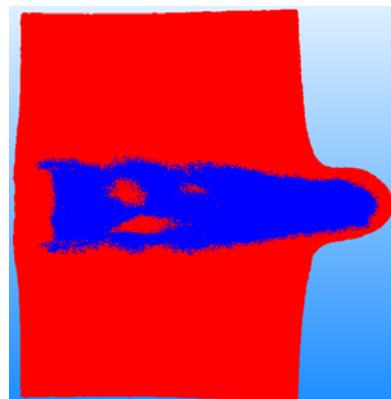
На рис. 16, 17 приведены разрезы ударников с мишенями для задач 8 и 7 по принадлежности к металлам (рис. 16); по дефектам (рис. 17). Из рис. 16 и 17 видно, что диаметр канала в задаче 8 уже, чем в задаче 7.

На рис. 18 приведены распределения плотностей и температур для задач 8 и 7 на один и тот же момент прохождения мишени,  $t = 122$  пс. Сравнение первых рисунков (распределение плотности) показало, что ударник с вытянутыми зернами оказался менее подверженным эрозии при прохождении мишени, он прошел больший, чем ударник в задаче 7, путь и по длине превосходит ударник с обычными зернами.

Распределение температур в задачах слегка отличается, но абсолютные значения близки друг к другу. Напомним, температура плавления железа составляет  $T_m = 1811$  К, а вольфрама –  $T_m = 3695$  К. Таким образом получается, что железо в ближней зоне вокруг ударников находится в расплавленном состоянии.

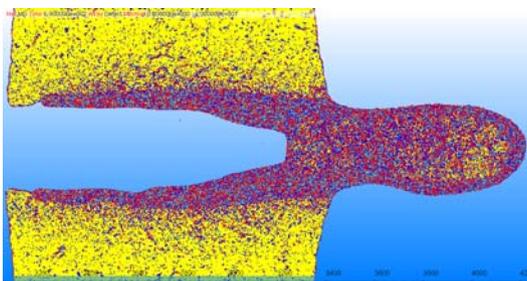


а

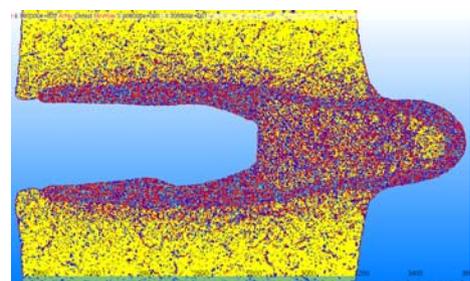


б

Рис. 16. Сравнение форм и размеров ударников для задач 8 (а) и 7 (б) на момент 258 пс, разрезы по центральной плоскости симметрии задач, окрас по типу вещества

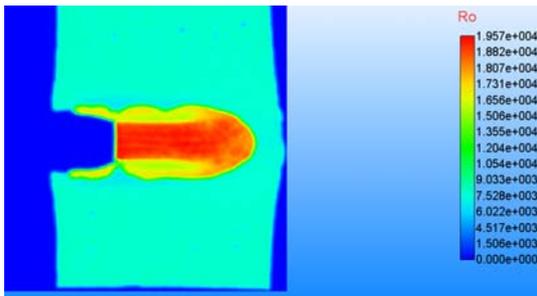


а

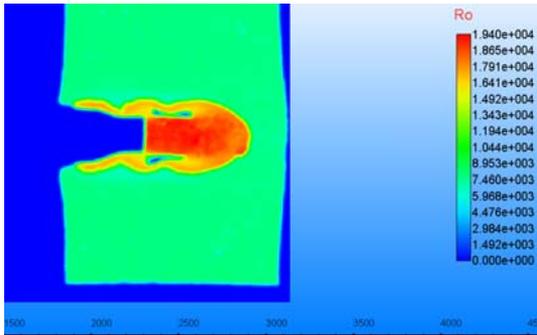


б

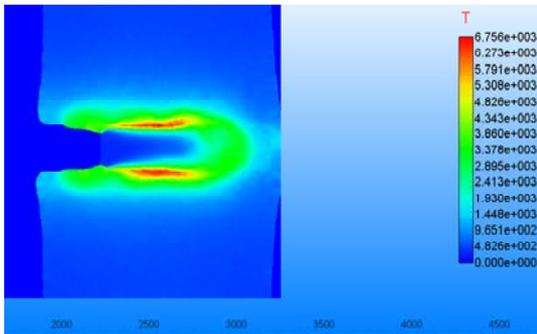
Рис. 17. Сравнение форм и размеров ударников в мишенях для задач 8 (а) и 7 (б) на момент 267 пс, разрезы по центральной плоскости симметрии задач, окрас по дефектам



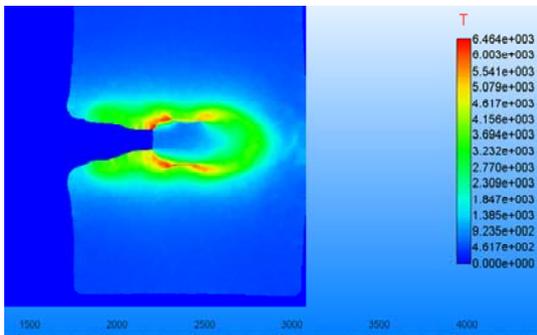
Задача 8



Задача 7



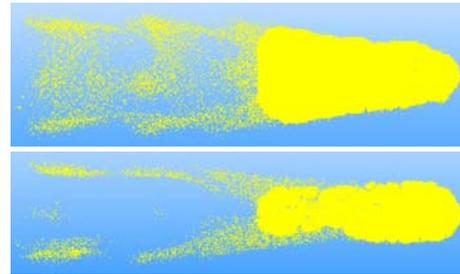
Задача 8



Задача 7

Рис. 18. Распределение плотности и температуры в задачах 8 и 7 на момент времени 122 пс, разрез по центральной плоскости симметрии задачи, шкала плотностей ( $\text{кг}/\text{м}^3$ ) и температур (К) справа

На рис. 19 приведены формы обоих ударников на момент окончания счета ( $t = 258$  пс), разрез в плоскости  $Y$ , ударник в задаче 7 имеет можно сказать “более классическую форму” с точки зрения реализации эффекта самозатачивания.



258 пс, задача 7

258 пс, задача 8

Рис. 19. Сравнение форм ударников на момент окончания счета для задач 7 и 8, показаны только атомы W, окрас по принадлежности к ОЦК структуре W

Наиболее интересным моментом в моделировании является фиксация процесса возникновения полос сдвига, приводящих к явлению самозатачивания. Это очень трудоемкая задача, поскольку приходится обрабатывать огромные массивы данных в поисках полос сдвига и начала их образования. В большинстве случаев мы получали просто картину распределения напряжений.

На рис. 20,а приведен разрез для задачи 7 (обычные зерна) на момент времени 122 пс, черным квадратом помечена область, для которой проводился расчет пространственного распределения полного тензора напряжений и температуры. На рис. 20,б, в приведено соответствующее распределение сдвиговой компоненты тензора напряжений  $\sigma_{xy}$  и температуры в этой области.

Из рис. 20,б видно, что полоса напряжений идет под углом, близким к  $45^\circ$ , что характерно для возникновения сдвиговых полос, в том числе и адиабатических полос сдвига. Характер распределения температурного поля коррелирует со сдвиговым.

На рис. 21 приведены аналогичные данные для задачи 8 также на момент 122 пс. В данном случае трудно сказать, что мы зафиксировали сдвиговую полосу. По величине значения напряжений для двух ударников имеют один порядок, но в задаче 8 они все же меньше.

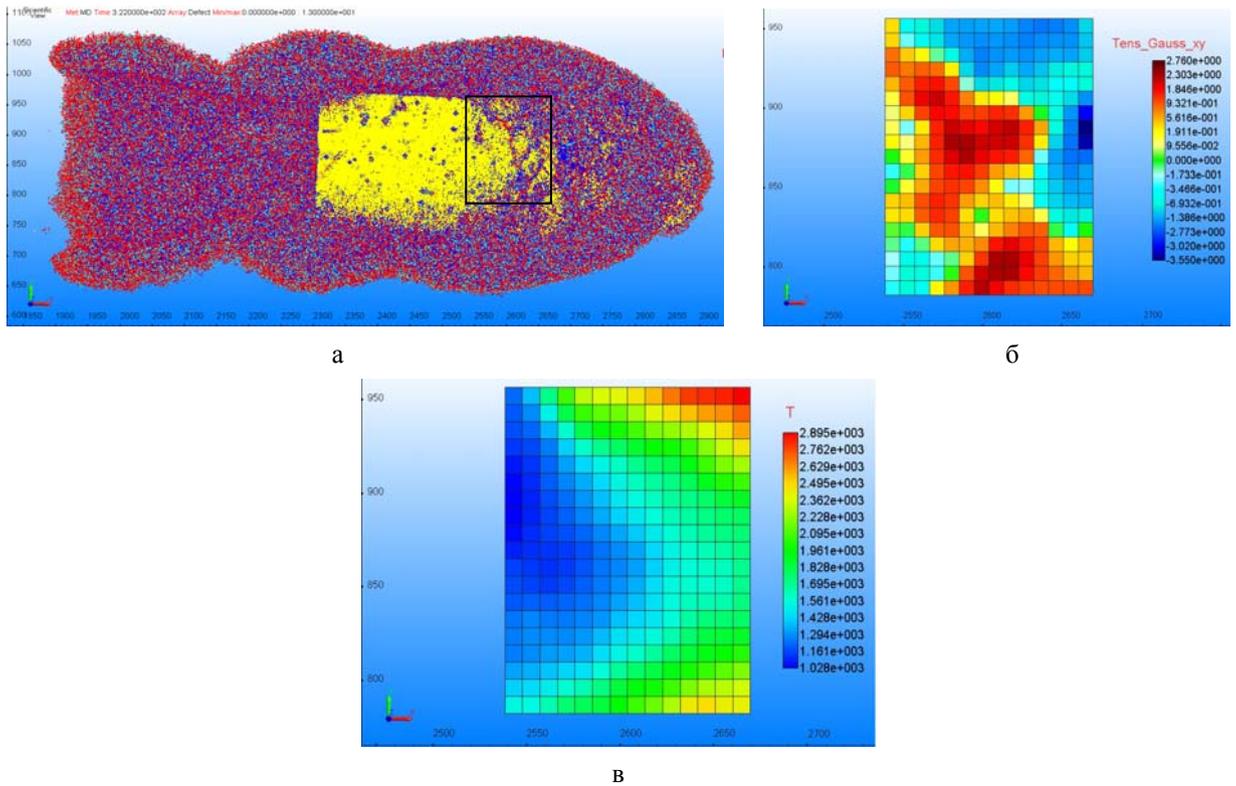


Рис. 20. Изображение ударника (а) и картина распределения сдвиговых напряжений ( $\sigma_{xy}$ ) в его носовой части (б) и температуры (в) в помеченной черным квадратом области на момент времени 122 пс для задачи 7. Шкала справа в ГПа и К соответственно

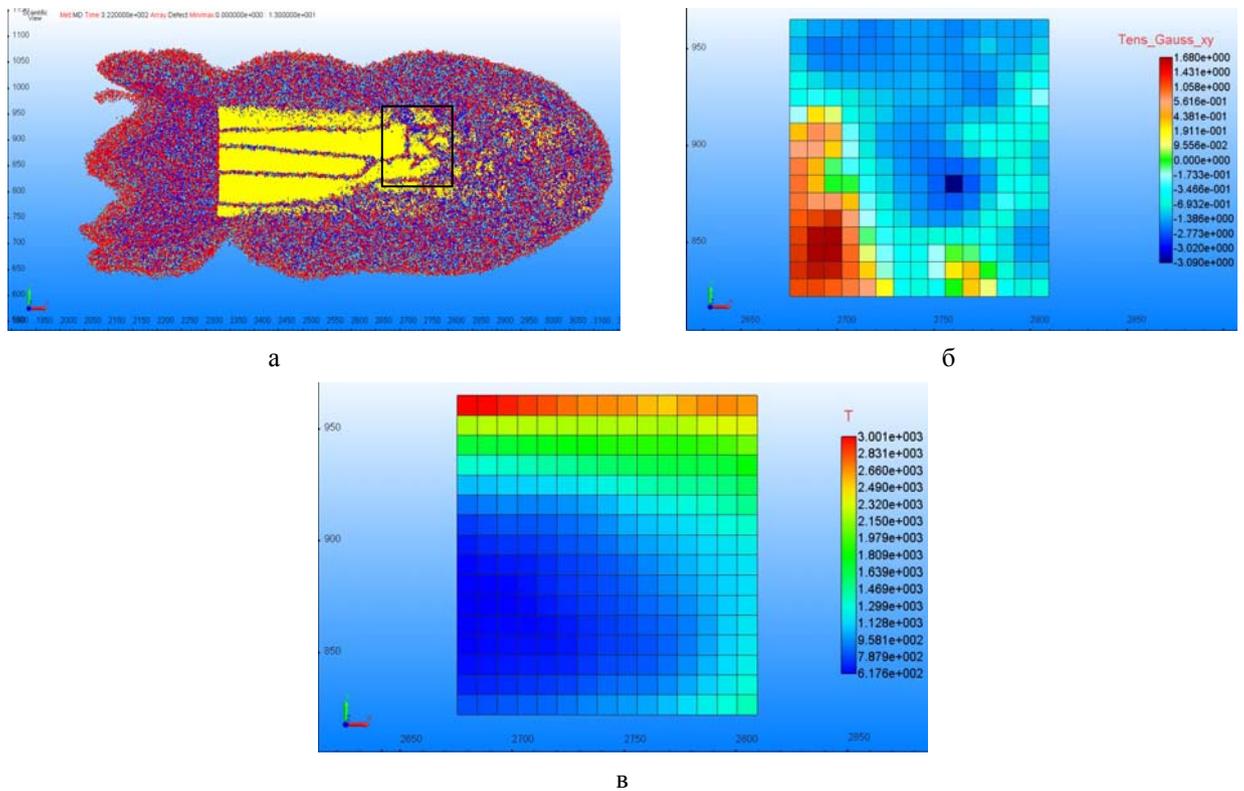


Рис. 21. Изображение ударника (а) и картина распределения сдвиговых напряжений ( $\sigma_{xy}$ ) в его носовой части (б) и температуры (в) в помеченной черным квадратом области на момент времени 122 пс для задачи 8. Шкала справа в ГПа и К соответственно

В заключение отметим, что волнообразный характер канала в мишенях характерен и для натурных экспериментов (рис. 22).

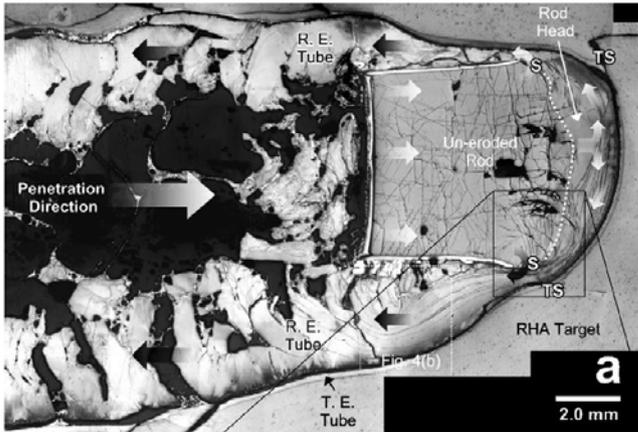


Рис. 22. Разрез стали с монокристаллическим [001] сердечником из W [15]

## Выводы

В данной работе приведены результаты молекулярно-динамического моделирования процесса проникания микроударника из вольфрама в мишень из железа. В расчетах использовались многочастичные ЕАМ потенциалы для вольфрама и железа. На микроуровне промоделирован процесс самозатачивания ударников из чистого вольфрама при проникании в железо с начальной скоростью больше некоторой пороговой.

Отметим, что несмотря на меньшие в  $\sim 10^5$  раз размеры ударников по сравнению с реальными, в расчетах сохраняются основные характерные качественные и даже количественные особенности картины их проникания. Так, например, значение пороговой скорости, при которой возникает эффект самозатачивания ударника, по нашим расчетам составляет  $\approx 2,1$  км/с, что хорошо согласуется с полученным экспериментально.

В работе представлены данные для зависимости глубины проникания от скорости и пространственные распределения сдвиговых напряжений сердечника в процессе проникания в мишень. Приведены результаты сравнительного молекулярно-динамического моделирования процесса проникания ударников из вольфрама в мишень из железа в случае, когда один ударник имел обычные “природные” зерна, а другой – вытянутые вдоль ударника. Отношение поперечного размера зерна к продольному составляло  $\approx 5$ . Подобную

структуру приобретает металл после горячего протягивания.

Необходимо отметить, что в классической МД электроны, как независимые объекты, не моделируются, они учитываются лишь в потенциале межатомного взаимодействия. Поэтому электронная теплопроводность отсутствует в классической МД. Для учета в МД электронной теплопроводности разработано несколько моделей, наиболее популярной является так называемая модель ТТМ [16, 17]. Модель ТТМ введена в MoDyS, поэтому в ближайшее время планируется провести контрольный расчет с учетом электронной теплопроводности для корректировки распределения температуры.

В ближайшее время нам предстоит изучить основные физические параметры обоих ударников, чтобы сделать конкретные выводы относительно полученной разницы в пробивной способности.

В результате молекулярно-динамического моделирования процесса проникания ударника из вольфрама в мишень из железа показано, что ударник из вольфрама с вытянутыми зернами имеет более высокую эффективность при пробивании мишени из железа по сравнению с ударником из обычных зерен, что качественно согласуется с выводами из экспериментов на установках Kolsky [13].

## Список литературы

1. Rosenberg Z. and Dekel E. *Terminal Ballistics*, Springer, Heidelberg, Dordrecht, London, New York, 2012.
2. Dodd B. and Bai Y. *Adiabatic Shear Localization. Frontiers and Advances*. Elsevier, 2012.
3. Rittel D., Landau P., Venkert A. *Dynamic Recrystallization as a Potential Cause for Adiabatic Shear Failure* // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. **101**. P. 165501.
4. Osovski S., Rittel D., and Venkert A. *The respective influence of microstructural and thermal softening on adiabatic shear localization* // Mech. Mater. 2013. Vol. **56**. P. 11–22.
5. Magness L. S. *High Strain Rate Deformation Behaviors of Kinetic Energy Penetrator Materials During Ballistic Impact* // Mech. Mater. 1994. Vol. **17**. P. 147–154.
6. Johnson W. L. *Bulk glass-forming metallic alloys: science and technology* // MRS Bull. 1999. Vol. **24**. P. 42.
7. Finnis M. W. and Sinclair J. E. // Phil. Mag. 1984. Vol. **50**. P. 45.

8. Ackland G. J. and Thetford R. An improved N-body semi-empirical model for body-centred cubic transition metals // *Phil. Mag.* 1987. Vol. **56**. P. 15.
9. Mendeleev M. I., Han S., Srolovitz D. J., Ackland G. J., Sun D. Y., Asta M. *Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron* // *Phil. Mag.* 2003. Vol. **83**. P. 3977.
10. Bonny G., Pasianot R. C., Terentyev D., and Malerba L. *Iron chromium potential to model high-chromium ferritic alloys* // *Phil. Mag.* 2011. Vol. **91**. P. 1724.
11. Hardy R. J. // *J. Chem. Phys.* 1982. Vol. **76**(1). P. 622–628.
12. Fang X., Jinxu Liu, Wang X., Li S., Guo W. *Investigation on the penetration performance and “self-sharpening” behavior of the 80W–14Cu–6Zn penetrators* // *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* 2016. Vol. **54**. P. 237–243.
13. Wei Q., Jiao T., Ramesh K.T., Ma E., Keskkes L. J., Magness L., Dowding R., Kazykhanov V., and Valiev R. *Mechanical Behavior and Dynamic Failure of High-Strength Ultrafine Grained Tungsten Under Uniaxial Compression* // *Acta Mater.* 2006. Vol. **54**. P. 77–87.
14. Yang Y., Lianxi H., Erde W. *Microstructure and mechanical properties of a hot-hydrostatically extruded 93W–4.9Ni–2.1Fe alloy* // *Mater. Sci. Eng.* 2006. Vol. A **435–436**. P. 620–624.
15. Pizana C., Murra L. E., Baquera M. T., Anchondo I. A., Putrevu A., Pina C. Y., Tamoria T. C., Chen H. C., Cytron S. J. *Solid-state flow, mechanical alloying, and melt-related phenomena for [001] single-crystal W ballistic rod penetrators interacting with steel targets* // *Mater. Sci. Eng. A.* 2006. Vol. **428**. P. 301.
16. Каганов М. И., Лифшиц И. М. и Танатаров Л. В. // *ЖЭТФ* 1956. Т. **31**. С. 232.
17. Анисимов С. И., Капелович Б. Л. и Перельман Т. Л. // *ЖЭТФ*. 1974. Vol. **66**. С. 776.

Статья поступила в редакцию 24.10.2017