

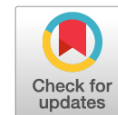
МЕХАНИКА MECHANICS



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2021-27-4-14-21

УДК 512.531; 519.7



Дата: поступления статьи: 17.09.2021
после рецензирования: 25.10.2021
принятия статьи: 25.11.2021

О.Н. Белова

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: BelovaONik@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4492-223X>

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛА, МОДЕЛИРУЕМОГО С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

АННОТАЦИЯ

В статье описан способ определения упругих констант материала, моделируемого с помощью метода молекулярной динамики в пакете LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Целью исследования является вычисление матрицы упругих постоянных C_{ij} или коэффициентов податливости S_{ij} материалов. Зная их, рассчитывают модули упругости вдоль определенных направлений и сдвига в системах сдвига, а также коэффициент Пуассона. Можно рассчитать экстремальные значения механических констант. Кроме того, могут быть определены линейные комбинации упругих констант, имеющие физический смысл. В качестве примеров для моделирования выбраны fcc монокристаллы меди и алюминия. Для визуализации упругих свойств применен расчетно-графический пакет ELATE.

Ключевые слова: упругие модули; метод молекулярной динамики; LAMMPS.

Цитирование. Белова О.Н. Определение механических свойств материала, моделируемого с помощью метода молекулярной динамики // Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия. 2021. Т. 27, № 4. С.14–21. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-14-21>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Белова О.Н., 2021

Белова Оксана Николаевна — аспирант кафедры математического моделирования в механике, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

1. Определение механических свойств материалов, моделируемых с помощью метода молекулярной динамики

Определение тензора упругих модулей является неотъемлемой задачей любого моделирования, проводимого методом молекулярной динамики. В статье приведена процедура вычисления упругих констант материала, моделируемого с помощью метода молекулярной динамики. Целью исследования является вычисление матрицы упругих постоянных C_{ij} или коэффициентов податливости S_{ij} материалов. Зная эти величины, рассчитывают модули упругости вдоль определенных направлений (n) и сдвига в системах сдвига (m, n), а также коэффициент Пуассона. Затем можно рассчитать экстремальные значения величин $E(n)$, $G(m, n)$ и $\mu(m, n)$. Кроме того, могут быть определены

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках гранта № 20-31-90082

линейные комбинации упругих констант, имеющие физический смысл. В ряде случаев вычисляются технические упругие модули (модули, которые измеряются в опытах на поликристаллах) с помощью усреднения по Фойгту, Ройсу или Хиллу и параметры упругой анизотропии.

В качестве примеров для моделирования выбраны fcc монокристаллы меди и алюминия. Известно, что закон Гука в тензорном виде имеет следующий вид:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}, \quad (1.1)$$

где σ_{ij} и ε_{kl} – тензоры напряжения и деформации. Так как эти тензоры симметричны, то тензор модулей упругости будет обладать симметрией и его можно записать в матричном виде. Закон Гука можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ \cdot & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ \cdot & \cdot & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & C_{1313} & C_{1312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & C_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Закон Гука может быть записан в эквивалентной тензорной форме, через тензор модулей податливости S_{ijkl}

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}. \quad (1.3)$$

Получим обратное матричное уравнение

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & S_{1123} & S_{1113} & S_{1112} \\ \cdot & S_{2222} & S_{2233} & S_{2223} & S_{2213} & S_{2212} \\ \cdot & \cdot & S_{3333} & S_{3323} & S_{3313} & S_{3312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & S_{2323} & S_{2313} & S_{2312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & S_{1313} & S_{1312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & S_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

В данной статье вычисляются упругие свойства монокристалла меди с определенным потенциалом взаимодействия с помощью метода молекулярной динамики (МД). Механические свойства зависят от кристаллической структуры. Вычислим упругие свойства для гранцентрированной меди. Получить тензор упругих модулей можно с помощью потенциальной энергии (ПЭ), вычисленной в ходе МД расчета. ПЭ зависит от тензора деформаций и может быть разложена в ряд Тейлора:

$$E(\varepsilon) = E(0) + \sum_i^6 \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_i} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^6 \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \varepsilon_i \varepsilon_j, \quad (1.5)$$

где $E(0)$ – энергия начального состояния равновесия, $\varepsilon_i \varepsilon_j$ – деформации в нотации Фойгта.

Компоненты тензора упругих констант материала можно рассчитать по следующей формуле:

$$C_{i,j} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j}. \quad (1.6)$$

После минимизации энергии деформирования второй член в разложении 1.5 устраняется.

Для определения первой компоненты тензора упругих модулей C_{11} необходимо провести моделирование одноосного растяжения образца. С этой целью зададим тензор деформаций в следующем виде:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Выражение для энергии примет следующий вид:

$$E(\varepsilon_1) = E(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} \delta^2 + \dots = \alpha + \beta \delta^2 + \gamma \delta^3 + \dots \quad (1.8)$$

Тогда константу C_{11} определим по формуле

$$C_{11} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} = \frac{2\beta}{V}. \quad (1.9)$$

Компоненту C_{12} не представляется возможным вычислить напрямую, но можно найти разность констант $C_{11} - C_{12}$. Зададим компоненты тензора деформаций

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & -\delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

тогда уравнение разложения потенциальной энергии примет вид

$$E(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = E(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} \delta^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_2^2} \delta^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1 \partial \varepsilon_2} \delta^2 + \dots = \alpha + \beta \delta^2 + \gamma \delta^3 + \dots \quad (1.11)$$

Константу C_{12} вычисляем из следующего выражения:

$$C_{12} = C_{11} - \frac{\beta}{V}. \quad (1.12)$$

Для вычисления компоненты тензора упругих модулей C_{44} зададим тензор деформаций в следующем виде:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \eta \\ 0 & \eta & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.13)$$

где $\delta = 2\eta$. Выражение для энергии примет вид

$$E(\varepsilon_4) = E(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_4^2} \delta^2 + \dots = E(0) + 2 \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_4^2} \eta^2 + \dots = \alpha + \beta \eta^2 + \gamma \eta^3 + \dots \quad (1.14)$$

Тогда C_{44} найдем по формуле

$$C_{44} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_4^2} = \frac{\beta}{2V} \quad (1.15)$$

2. Определение механических свойств монокристаллов меди и алюминия

МД моделирование выполнено с применением потенциала внедренного атома (embedded atom model — EAM), который является наиболее часто используемым потенциалом для моделирования меди. Данный потенциал реализован в файле Cu_u3.eam, содержащемся в библиотеке потенциалов [1]. Монокристаллическая медь имеет гранецентрированную кубическую структуру (face-centered cubic — fcc) с постоянной решетки 3.615 Å. Для определения тензора упругих модулей гранецентрированной кубической меди был проведен ряд расчетов в пакете LAMMPS [2]. Моделировался образец кубической формы, имеющий размеры 36.15x36.15x36.15 Å и содержащий 4000 атомов, к которому прикладывались различные деформации. Температура системы равна 0.1 К и поддерживается с помощью термостата Нойза-Гувера в каноническом NVT ансамбле. В результате расчета сохранялись значения потенциальной энергии и деформаций. Потенциальная энергия в LAMMPS вычисляется в эВ, а объем в Å³. Выполнен пересчет энергии в ГПа, а объема в м³. Затем аппроксимировали график зависимости энергии от деформации полиномиальной кривой. Используя коэффициенты данной кривой, проведено вычисление компонентов тензора упругих модулей. На рис. 2.1 приведен график зависимости потенциальной энергии от деформации, полученный для вычисления модуля C_{11} . Точками отмечены результаты молекулярно-динамического расчета, прямая линия — это аппроксимирующая полиномиальная кривая. На рис. 2.1 приведено уравнение полиномиальной кривой, из которой получим $\beta = 24645$. Подставив данное число в уравнение 1.9, получим $C_{11} = 167.25$ ГПа. Затем прикладываем к данному образцу растягивающую деформацию вдоль оси x и сжимающую вдоль y . Получаем график зависимости потенциальной энергии от деформации. Строим новую аппроксимирующую кривую и вычисляем компоненту тензора упругих модулей C_{12} . На рис. 2.2 приведено уравнение полиномиальной кривой, из которой найдем $\beta = 12709$. Подставив β в уравнение 1.12, получим $C_{12} = 123.81$ ГПа. Для вычисления компоненты тензора упругих модулей C_{44} к образцу прикладывается сдвиговая нагрузка. Аналогично строим график зависимости потенциальной энергии от деформации и ее аппроксимирующую функцию. По формуле 1.15 вычисляем коэффициент $C_{44} = 76.46$ ГПа. Таким образом, получили тензор упругих модулей, содержащий 3 независимых упругих константы, что соответствует кубической кристаллической решетке.

$$\begin{bmatrix} 167.25 & 123.81 & 123.81 & 0 & 0 & 0 \\ 123.81 & 167.25 & 123.81 & 0 & 0 & 0 \\ 123.81 & 123.81 & 167.25 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 76.46 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 76.46 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 76.46 \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

Для определения компонент тензора упругих модулей существует код в LAMMPS, написанный Эйданом Томпсоном, который может быть модифицирован для других типов решетки и потенциалов. Автор создает блок моделирования размерами 20x20x20 ячеек моделирования при нулевой температуре

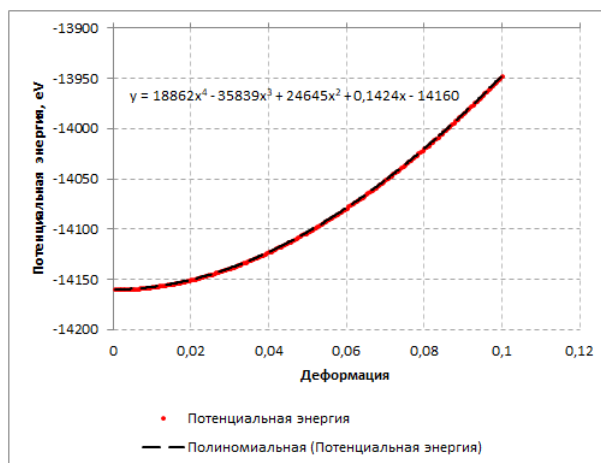


Рис. 2.1. График зависимости потенциальной энергии системы от деформации и ее аппроксимация полиномиальной кривой, построенный для вычисления компоненты тензора упругости C_{11}
 Fig. 2.1. Graph of the dependence of the potential energy of the system on deformation and its approximation of a polynomial curve constructed to calculate the elasticity tensor component C_{11}

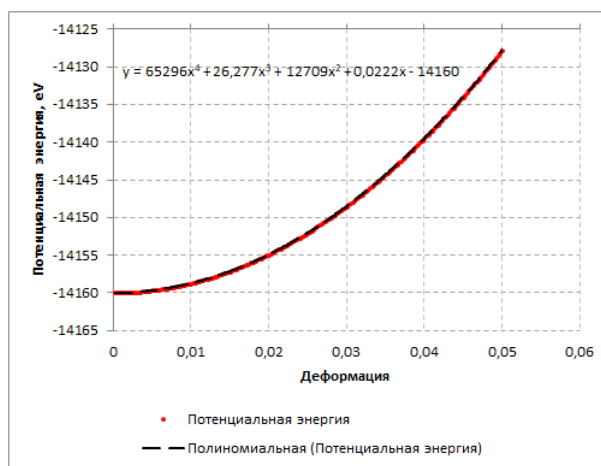


Рис. 2.2. График зависимости потенциальной энергии системы от деформации и ее аппроксимация полиномиальной кривой, построенный для вычисления компоненты тензора упругости C_{12}
 Fig. 2.2. Graph of the dependence of the potential energy of the system on deformation and its approximation of a polynomial curve constructed to calculate the elasticity tensor component C_{12}

и определяет упругие константы путем его положительного и отрицательного деформирования в одном из шести направлений с помощью команды *change_box* и вычисления изменения тензора напряжений. Результаты, полученные в данной работе, сравнили со значениями, вычисленными с помощью программного кода Томсона, и получили хорошее совпадение.

Известны несколько схем определения упругих констант: Фойгта и Ройса. Общая формула, выражающая зависимость модуля упругости и модуля сдвига по Фойгту:

$$\begin{aligned} 9B_V &= (C_{11} + C_{22} + C_{33}) + 2(C_{12} + C_{23} + C_{31}), \\ 15G_V &= (C_{11} + C_{22} + C_{33}) - (C_{12} + C_{23} + C_{31}) + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}). \end{aligned} \quad (2.2)$$

По Ройсу:

$$\begin{aligned} \frac{1}{B_R} &= (S_{11} + S_{22} + S_{33}) + 2(S_{12} + S_{23} + S_{31}), \\ \frac{15}{G_R} &= 4(S_{11} + S_{22} + S_{33}) - 4(S_{12} + S_{23} + S_{31}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Часто используют аппроксимацию Фойгта — Ройса — Хилла, где модуль сдвига, модуль упругости и изотермический коэффициент всестороннего сжатия имеют простой вид

$$G = \frac{1}{2}(G_V + G_R), \quad B = \frac{1}{2}(B_V + B_R), \quad \tau = \frac{1}{B}. \quad (2.4)$$

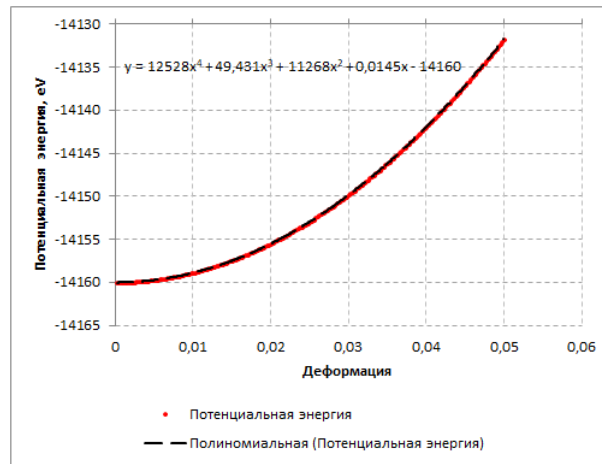


Рис. 2.3. График зависимости потенциальной энергии системы от деформации и ее аппроксимация полиномиальной кривой, построенный для вычисления компоненты тензора упругости C_{44}
 Fig. 2.3. Graph of the dependence of the potential energy of the system on deformation and its approximation of a polynomial curve constructed to calculate the elasticity tensor component C_{44}

Средние значения коэффициента Пуассона ν и модуля Юнга E определяются через G и B

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)}, \quad E = \frac{9BG}{3B + G}. \quad (2.5)$$

Для различных кристаллических решеток количество независимых констант различается, поэтому для каждой решетки эти формулы будут уникальны. В кубической решетке три линейно независимые константы: C_{11}, C_{12}, C_{44} . Модуль всестороннего сжатия и модуль сдвига по Фойгту и Ройсу вычисляются по следующим формулам:

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}, \quad G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5}, \quad G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})}. \quad (2.6)$$

Для рассматриваемого материала получим модуль всестороннего сжатия $B_V = B_R = 138.29$ ГПа и модуль сдвига по Фойгту и Ройсу $G_V = 54.56$ ГПа, $G_R = 38.07$ ГПа, соответственно. По формулам Хилла получим модуль сдвига $G = 46.32$ ГПа, модуль всестороннего сжатия $B = 138.29$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0.35$ и модуль Юнга $E = 125$ ГПа.

Для визуализации упругих свойств можно применить расчетно-графический пакет ELATE – Elastic tensor analysis. Данная оболочка представлена на сайте [3]. Пользователь вводит матрицу упругих модулей и получает средние значения свойств, двух- и трехмерную визуализацию упругих свойств и др.

Получив тензор упругих модулей, а затем рассчитав тензор податливости S_{ij} , можно определить распределение упругих модулей в зависимости от приложения деформаций под разными углами. Ненулевые компоненты тензора податливости могут быть вычислены по следующим формулам:

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}, \quad S_{12} = \frac{-C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}, \quad S_{44} = \frac{1}{C_{44}} \quad (2.7)$$

Таким образом, получили тензор податливости в следующем виде:

$$\begin{bmatrix} 16.15 \cdot 10^{-3} & -6.86 \cdot 10^{-3} & -6.86 \cdot 10^{-3} & 0 & 0 & 0 \\ -6.86 \cdot 10^{-3} & 16.15 \cdot 10^{-3} & -6.86 \cdot 10^{-3} & 0 & 0 & 0 \\ -6.86 \cdot 10^{-3} & -6.86 \cdot 10^{-3} & 16.15 \cdot 10^{-3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 13.07 \cdot 10^{-3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 13.07 \cdot 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 13.07 \cdot 10^{-3} \end{bmatrix}. \quad (2.8)$$

Получив тензор упругих модулей, рассчитав тензор податливости, можно определить распределение модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона в зависимости от приложения деформаций под разными углами по следующим формулам:

$$E = \frac{1}{(a_i a_j a_k a_l S_{ijkl})}, \quad a = \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

$$G = \frac{1}{(4a_i b_j a_k b_l S_{ijkl})}, b = \begin{pmatrix} \cos\theta \cos\varphi \cos\gamma - \sin\theta \sin\gamma \\ \cos\theta \sin\varphi \cos\gamma + \cos\theta \sin\gamma \\ -\sin\theta \cos\gamma \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$G = -\frac{a_i a_j b_k b_l S_{ijkl}}{(a_i a_j a_k a_l S_{ijkl})}. \quad (2.11)$$

Задавая координаты x, y, z радиус-вектора в любом направлении, согласно вычисленным компонентам тензора податливости откладывается относительное удлинение упругих модулей. Полученные картины иллюстрируют относительное удлинение модулей в каждом направлении для гранцентрированной кубической меди. На рис. 2.4 приведены трехмерные представления упругих констант, полученные из результатов работы электронного ресурса ELATE [3].

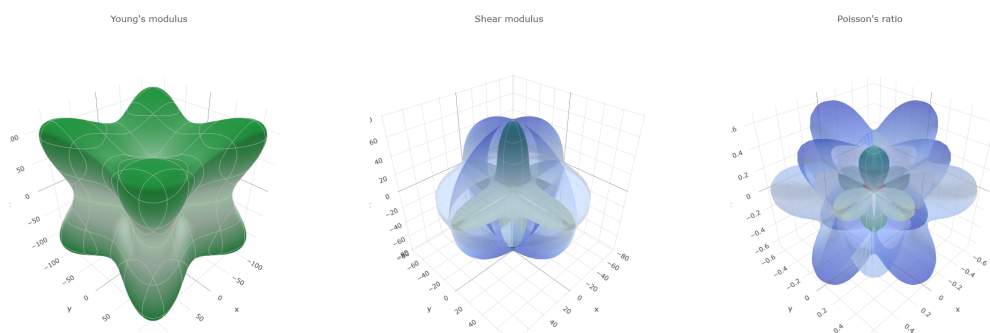


Рис. 2.4. Визуализация модуля Юнга, модуля сдвига, коэффициента Пуассона монокристалла меди
 Fig. 2.4. Visualization of Young's modulus, shear modulus, Poisson's ratio of copper single crystal

Аналогичное исследование, может быть выполнено и для определения механических свойств алюминия. Взаимодействие между атомами алюминия также описывается с помощью потенциала внедренного атома. Тензор упругих модулей для алюминия, содержащий 3 независимых упругих константы, что соответствует кубической кристаллической решетке, имеет вид

$$\begin{bmatrix} 107.87 & 81.44 & 81.44 & 0 & 0 & 0 \\ 81.44 & 107.87 & 81.44 & 0 & 0 & 0 \\ 81.44 & 81.44 & 107.87 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 46.16 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 46.16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 46.16 \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

По формулам Хилла, используя найденные компоненты тензора напряжений, получили модуль Юнга $E = 76.24$, коэффициент Пуассона $\nu = 0.36$, модуль всестороннего сжатия $B = 90.25$, модуль сдвига $G = 28.05$. На рис. 2.5 приведены трехмерные представления упругих констант алюминия, полученные из результатов работы электронного ресурса ELATE.

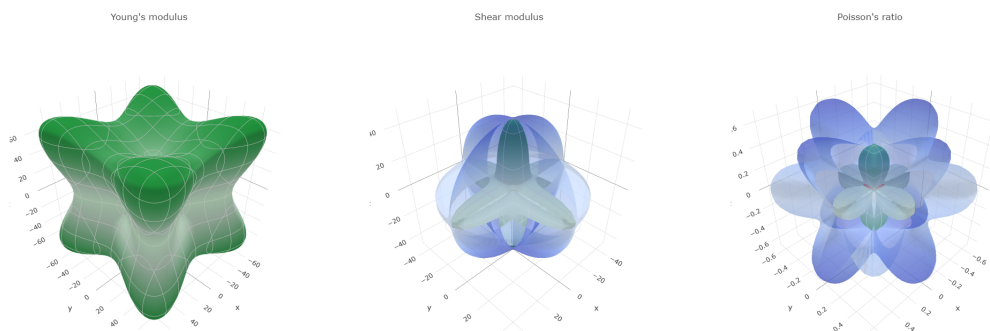


Рис. 2.5. Визуализация модуля Юнга, модуля сдвига, коэффициента Пуассона монокристалла алюминия
 Fig. 2.5. Visualization of Young's modulus, shear modulus, Poisson's ratio of aluminum single crystal

Найденные значения упругих модулей меди были использованы в работах [5; 6], посвященных определению коэффициентов разложения Уильямса в окрестности вершины трещины.

Выводы

В статье приведена процедура определения упругих констант материала, моделируемого в пакете LAMMPS, реализующем метод молекулярной динамики. В результате комплекса расчетов найдены матрицы упругих постоянных C_{ij} или коэффициентов податливости S_{ij} fcc монокристаллов меди и алюминия. Были рассчитаны такие свойства материалов, как модуль Юнга, модуль сдвига, модуль всестороннего сжатия и коэффициент Пуассона. Для визуализации упругих свойств применен расчетно-графический пакет ELATE.

Литература

- [1] Interatomic Potentials Repository. URL: <https://www.ctcms.nist.gov/potentials>.
- [2] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov>.
- [3] ELATE - Elastic tensor analysis. URL: <http://progs.coudert.name/elate>.
- [4] Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. 2022. Vol. 119. P. 103298. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103298>. EDN: <https://elibrary.ru/wqtbws>.
- [5] Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations // Mechanics of Advanced Materials and Structures. 2022. DOI: <http://doi.org/10.1080/15376494.2022.2084800>.
- [6] Stepanova L.V., Belova O.N. Computation of conventional fracture mechanics parameters via molecular dynamics simulations // Procedia Structural Integrity. 2021. Vol. 40(C). P. 392–405. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.prostr.2022.04.053>.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2021-27-4-14-21

Submitted: 17.09.2021

Revised: 25.10.2021

Accepted: 25.11.2021

O.N. Belova

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: BelovaONik@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4492-223X>

DETERMINATION OF MECHANICAL PROPERTIES OF A MATERIAL MODELED USING THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD²

ABSTRACT

The article discusses a method for determining the elastic constants of a material modeled using the molecular dynamics method in the LAMMPS package (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). The purpose of the study is to calculate the matrix of elastic constants C_{ij} or the compliance coefficients S_{ij} of materials. Knowing them, elastic modulus is calculated along certain directions and shear in shear systems, as well as the Poisson's ratio. Extreme values of mechanical constants can be calculated. In addition, linear combinations of elastic constants that have a physical meaning can be determined. FCC single crystals of copper and aluminum were selected as examples for modeling. The ELATE - Elastic tensor analysis computational and graphical package is used to visualize elastic properties.

Key words: elastic modules; molecular dynamics method; LAMMPS.

Citation. Belova O.N. Determination of mechanical properties of a material modeled using the molecular dynamics method. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaia seriia = Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2021, vol. 27, no. 4, pp. 14-21. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-14-21>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

²The work is carried out with the support of the Russian Foundation for Basic Research within the grant № 20-31-90082

© Belova O.N., 2021

Oksana N. Belova — postgraduate student of the Department of Mathematical Modeling in Mechanics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

References

- [1] Interatomic Potentials Repository. Available at: <https://www.ctcms.nist.gov/potentials>.
- [2] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Available at: <http://lammps.sandia.gov>.
- [3] ELATE — Elastic tensor analysis. Available at: <http://progs.coudert.name/elate>.
- [4] Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2022, vol. 119, p. 103298. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103298>. EDN: <https://elibrary.ru/wqtbws>.
- [5] Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 2022. DOI: <http://doi.org/10.1080/15376494.2022.2084800>.
- [6] Stepanova L.V., Belova O.N. Computation of conventional fracture mechanics parameters via molecular dynamics simulations. *Procedia Structural Integrity*, 2021, vol. 40(C), pp. 392–405. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.prostr.2022.04.053>.