

## ЛИТЕРАТУРА

1. K. W. Ragland, J. A. Nicholls. AIAA J., 1969, 7, 5.
2. M. Sichel, C. S. R. Rao, J. A. Nicholls. 13-th Symp. (Internat). Comb. Utah, 1970.
3. C. S. R. Rao, M. Sichel, J. A. Nicholls. Comb. Sci. Techn., 1972, 4, 5.
4. С. Г. Зайцев. ПТЭ, 1958, 6.
5. М. Е. Топчийн. ПМТФ, 1962, 4.
6. В. В. Митрофанов. ПМТФ, 1962, 4.
7. В. В. Митрофанов, В. А. Субботин, М. Е. Топчийн. ПМТФ, 1963, 3.
8. Р. И. Солоухин. Ударные волны и детонация в газах. Физматгиз, 1963.
9. А. В. Пинаев, В. В. Митрофанов. Докл. АН СССР, 1975, 225, 3.
10. А. В. Пинаев. ФГВ, 1977, 13, 3.
11. А. В. Пинаев, В. А. Субботин. ФГВ, 1982, 18, 5.
12. Т. П. Гавриленко, Ю. А. Николаев. ФГВ, 1982, 18, 3.
13. Б. В. Войцеховский, В. В. Митрофанов, М. Е. Топчийн. Структура фронта детонации в газах. Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1963.
14. И. И. Смирнов. Вестн. МГУ. Сер. 1. Мат., мех., 1980, 2.

## МИКРОСТРУКТУРА УДАРНЫХ ВОЛН В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ

*Е. А. Дынин*  
(Москва)

### Введение

Одна из центральных проблем теории высокоскоростной деформации — описание на молекулярном уровне структуры ударных волн в твердых телах. В то время как для газов эта проблема успешно решается применением аппарата молекулярно-кинетической теории [1], в случае конденсированных материалов из-за сильного межчастичного взаимодействия необходим иной подход, непосредственно учитывающий движение атомов среды. Уже первые результаты, полученные на этом пути [2], оказались весьма неожиданными и вывели задачу за рамки определения ширины ударного слоя  $\Delta$ , поставив под сомнение саму применимость соотношений Гюгонно, лежащих в фундаменте традиционной интерпретации динамических экспериментов [1, 3]. К сегодняшнему дню обсуждаемая тематика отражена более чем в пятидесяти публикациях, в которых изучались различные аспекты вопроса и модельные системы, но без всестороннего анализа проблемы в целом.

Настоящая работа представляет собой дополненный новыми результатами критический анализ современного состояния микроскопической теории ударного сжатия идеальных непроводящих кристаллов. В работе последовательно обсуждаются осцилляционные «отклики» периодических атомарных структур на разрывное изменение граничных условий при пулевой температуре, влияние тепловых флуктуаций на диссипацию и установление стационарных режимов распространения волнового фронта, распределение энергии между детерминированными и стохастическими колебаниями, а также результаты молекулярно-динамического моделирования, рассматриваемые главным образом в контексте вопроса о выполнении соотношений Гюгонно. В заключительном разделе даны общие выводы из проведенного анализа и кратко сформулированы основные направления дальнейших исследований.

### Механическая модель

Известно, что для твердых тел при не очень высоких температурах упругие характеристики определяются в основном межатомным потенциалом, а вклад тепловых эффектов оказывается малым. Это обстоятель-

ство в какой-то степени может служить оправданием для моделирования ударного сжатия кристаллов в рамках чисто механической модели с атомами, первоначально покоящимися в узлах решетки [2]. Такой подход существенно упрощает задачу, так как при сжатии вдоль оси симметрии плоскости кристалла сдвигаются параллельно друг другу, взаимодействуя между собой подобно частицам одномерной цепочки. Обозначая смещение этих частиц из первоначальных положений через  $s_n(t)$  и потенциал взаимодействия плоскости  $n$  с плоскостью  $n'$ , отнесенный к массе плоскости, — через  $\Phi_{nn'}$ , задачу о динамическом сжатии с массовой скоростью  $u_p$  можно сформулировать в виде:

$$\ddot{s}_n = - \frac{\partial}{\partial s_n} \left( \sum_{n'} \Phi_{nn'} \right); \quad (1)$$

$$s_0(t) = u_p t, \quad s_n(0) = \dot{s}_n(0) = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

Численное решение этой задачи, впервые осуществленное в [2], выявило колебательную структуру волны и эффект нарушения соотношений Гюгонио для ангармонических кристаллов. В частности, если начальное межплоскостное расстояние обозначить через  $a_0$ , значение этой величины на хвосте сжатой области — через  $a_1$  и скорость волны — через  $D$ , то оказывается, что не соблюдается уже первое из этих соотношений, согласно которому:

$$a_1 = a_0 (1 - u_p/D). \quad (3)$$

Легко доказать, что в механической модели не может реализоваться традиционно постулируемый режим, для которого справедливы одновременно все три соотношения. Действительно, в таком случае их можно было бы рассматривать в качестве трех уравнений для всего двух величин, например  $u_p$  и  $D$ , как функций от степени сжатия ( $a_0/a_1$ ), однозначно задающей натяжение (аналог давления) и энергию в рамках механики. Анализ показывает, что уравнения оказываются совместными только для гармонического кристалла, когда правая часть (1) линейна по  $s_n$ . Для ангармонических цепочек либо существуют колебания конечной амплитуды на хвосте сжатой области, либо при отсутствии таковых размер  $l$  переходной зоны, отделяющей невозмущенную область от однородно деформированной, должен удовлетворять условию

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (l/Dt) = K > 0. \quad (4)$$

Таким образом, отклонение от соотношений Гюгонио при  $T_0 = 0$  — неотъемлемая черта механической модели, само по себе в силу пренебрежения тепловыми эффектами оно не должно указывать на обсуждаемую в [2] необходимость модификации существующей методики обработки ударно-волновых экспериментов. Тем не менее анализ модельной задачи (1), (2) служит необходимым этапом исследования проблемы в целом [4]. Наиболее полное численное решение этой задачи было проведено в работе [5] для набора потенциалов, включавшего в себя и потенциал Тода, имеющий вид

$$\Phi_{n,n+1} = \Phi(z_n) = c_0^2/4\alpha^2 \cdot [\exp(2\alpha z_n) - 2\alpha z_n - 1]. \quad (5)$$

Здесь учитывается взаимодействие только ближайших соседей,  $z_n = (s_n - s_{n+1})/a_0$  — величина, положительная при сжатии (деформация, взятая с обратным знаком);  $c_0$  — начальное значение скорости звука;  $\alpha$  — параметр нелинейности.

На рис. 1 схематически представлены результаты расчетов [5] с потенциалом (5), причем для всех случаев характерен связанный с периодичностью кристалла колебательный профиль ударной волны с периодом и амплитудой, уменьшающимися по мере удаления от фронта. Однако структура волны подвержена сильной зависимости от параметров задачи.

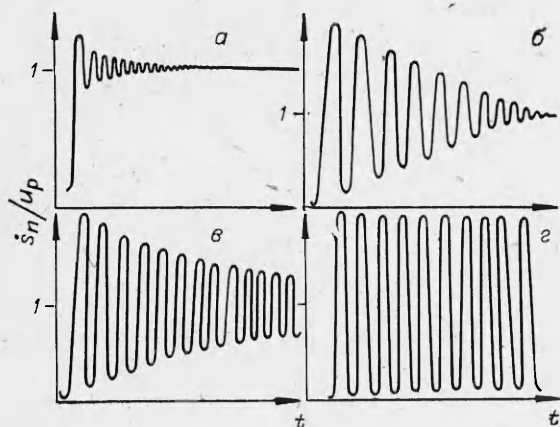


Рис. 1. Зависимость скорости частицы от времени в механической модели с потенциалом (5).

цилляции обеспечивает выполнение соотношений Гюгионо, в соответствии с которыми  $D = c_0$ . При конечных значениях  $\alpha$  с точностью до масштабных преобразований решение определяется единственным безразмерным параметром  $\gamma = \alpha u_p / c_0$  и характеризуется максимальным значением скорости на фронте, составляющим  $2u_p$ , а также нарушением соотношений Гюгионо. При  $\gamma \ll 1$  (рис. 1, б) выполняется условие (4), при  $\gamma \sim 1$  колебания с конечной амплитудой возникают и на хвосте сжатой области (рис. 1, в). С дальнейшим ростом  $\gamma$  эта амплитуда возрастает (рис. 1, г) и в пределе  $\gamma \rightarrow \infty$  профиль превращается в последовательность одинаковых прямоугольных импульсов.

В последнем случае при  $\alpha \rightarrow \infty$   $\Phi(z_n > 0) \rightarrow \infty$ , и задача может быть сведена к расчету динамического сжатия системы периодически расположенных на прямой твердых сфер, который проводится аналитически [5]. Отметим, что в подобной модели внутренняя энергия и натяжение отсутствуют, а средние по периоду значения скорости и деформации постоянны за фронтом, что приводит к выполнению условия (3), если в нем под  $a_1$  понимать среднее по периоду колебаний межчастичное расстояние.

В гармонической модели интегральное представление решения для достаточно общей постановки впервые получено в [6], а асимптотический закон спада амплитуды осцилляций  $n$ -й частицы  $\sim nt^{-3/2}$  определен в [7].

При  $\gamma \ll 1$  может быть использована усеченная форма потенциала (5)

$$\Phi(z) = c_0^2 z^2 (1/2 + \alpha/3 \cdot z), \quad (6)$$

описывающая также широкий класс других потенциалов в области слабых сжатий. В работах [7, 8] найдено аналитическое решение задачи (1), (2), (6), полученное на основе ее континуального аналога и справедливое при больших временах. Для этого использовано известное в нелинейной теории волн [9] решение о распаде разрыва в уравнении Кортевега — де Вриза. По терминологии, принятой в этой теории, профиль состоит из области постоянного течения и примыкающей к фронту области длиной  $l = 5\gamma c_0 t/3$ , заполненной кноидальными волнами с медленно меняющимися параметрами. Передний участок фронта представляет собой последовательность импульсов специфического вида — так называемых солитонов [4, 9],двигающихся, здесь со скоростью  $D = c_0(1 + 2\gamma/3)$ . Существенно, что вся область колебаний характеризуется неоднородностью распределения средней по периоду скорости, что иллюстрируется рис. 2.

Важной особенностью асимптотического режима в случае слабых волн является его большое время установления  $t \gg a/c_0 \gamma^{3/2}$ . Для выполнения приведенного условия пришлось включить в расчет на ЭВМ свы-

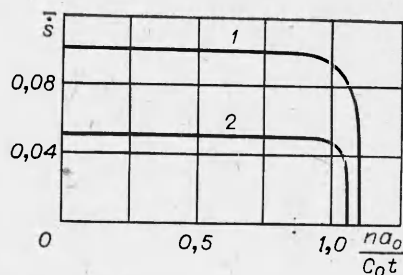


Рис. 2. Распределение средней по периоду скорости  $\bar{s}$  для модели (6) при  $\alpha = 3$  для  $u_p/c_0 = 0,1$  (1) и 0,05 (2).

Так, в простейшем случае  $\alpha \rightarrow 0$  (рис. 1, а) потенциал становится гармоническим и быстрое спадание осцилляций

ше  $10^3$  частиц [7], что позволило получить хорошее согласие с аналитическим результатом. Отметим, что в численных расчетах работ [3, 5, 10—12] при достаточно малых  $\gamma$  выписанное условие не удовлетворялось, а рассматривался фактически выход решения на асимптотику, сопровождающийся возрастанием значения максимума скорости от  $u_p$  до  $2u_p$ . Начальный этап этого процесса неплохо описывается аналитически с помощью асимптотического метода, развитого в [12], но расчет заключительного этапа при  $\gamma \ll 1$  производился лишь численно [13, 14]. Хотя для одного из вариантов решаемых редуцированных уравнений в частных производных аналитический результат получен значительно раньше в работах [7, 8].

В этих работах исключительно из требований компактности изложения приведены только формулы для деформации. Ввиду приближенного характера решения соответствующие формулы для величины  $(z_n/z_0)$  с формальной той же погрешностью порядка  $\gamma$  применимы и к профилю безразмерной скорости  $(\dot{s}_n/u_p)$ . Дополнительный анализ данных расчета на ЭВМ показал, что лучшее согласие достигается именно в этом случае, когда профиль скорости таков, что передний импульс имеет форму солитона с амплитудой  $u_{\max} = 2u_p$ . Более того, как вытекает из проведенного нами сопоставления с результатами многочисленных машинных расчетов [2, 5, 7, 10, 11] при различных видах  $\Phi$ , подобное описание формы переднего импульса оказывается вполне удовлетворительным вплоть до границы применимости континуального приближения, отвечающей примерно  $D = 1,5 c_0$ . Обобщая на случай произвольного  $\Phi$  односолитонное решение, полученное в этом приближении для потенциала (6) [15], найдем зависимость  $D(u_p)$  для волн умеренной интенсивности в неявном виде

$$2u_p^2 = \Phi(2u_p/D). \quad (7)$$

Количественным подтверждением солитонной структуры фронта служит также отмеченное в [16] совпадение рассчитанных по теории солитонов с  $u_{\max} = 2u_p$  нескольких значений  $D$  с данными численного решения задачи (1), (2) для потенциала (5). Нами установлено, что аналогичным свойством обладают и результаты численного моделирования, проведенного в [5] для того же потенциала в более широком диапазоне параметров  $\gamma \leq 52,5$ . Примечательной особенностью уравнения (1) в этом случае является существование солитонных решений вне рамок континуального приближения [9], что позволяет при любых  $\gamma$  представить зависимость  $D(\gamma)$  в следующем параметрическом виде:

$$D/c_0 = \text{sh } \kappa/\kappa, \quad \gamma = 2(\text{ch } \kappa - 1). \quad (8)$$

Как и следовало ожидать, результаты (7), (8) отличаются от формулы  $u_p D = \Phi'(u_p/D)$ , соответствующей выполнению первых двух соотношений Гюгонио, и в этих предположениях для частного случая модели (6), приведенной в [5, 10—13].

Картина, представленная на рис. 1, должна описывать асимптотический режим и при ином способе моделирования ударной волны, например путем постепенного нарастания  $\dot{s}_0(t)$  до значения  $u_p$  либо в результате воздействия на крайнюю частицу внешней силы, либо по явно задаваемому закону [14]. Такой вывод относится к потенциалам без аномалий, которые обеспечивают возрастание скорости распространения малых возмущений со степенью сжатия. Если это условие не выполнено, то в соответствии с макроскопическим анализом ударно-волновых конфигураций [13] возникает и принципиально иная микроструктура, в частных случаях изученная в [17]. Кроме того, в [16] указано на некоторую нерегулярность колебаний при  $\gamma > 1$  в передней части фронта. Этот эффект не отражен на рис. 1, г, так как он не отмечен в [5] и иллюстрирован в [16] лишь на примере зависимости  $\dot{s}_n(n)$  при  $t = \text{const}$ , для которой в силу дискретности  $n$ , малости длины волны и отличия ее фор-

мы от синусоиды фазы колебаний могут лишь казаться нескоррелированными. В целом, независимо от деталей для обычно рассматриваемых  $\Phi$ , можно сделать общий вывод: в рамках механики решетки реализуется осцилляционный профиль, причем при наличии ангармонизма нарушаются соотношения Гюгонио, для зоны сжатия характерна неоднородность распределения средних по периоду значений величин, а передние импульсы на профиле скорости представляют собой солитоны с амплитудой  $2u_p$ .

### Статистический подход

Проблема анализа тепловых явлений при ударном сжатии кристалла на микроскопическом уровне тесно связана с фундаментальной проблемой взаимоотношения механики и статистики. Ее положительное решение позволило бы на конкретном примере продемонстрировать, каким образом обратимые уравнения механики, описывающие движение атомов, приводят к необратимому процессу для системы в целом. Современное состояние рассматриваемого вопроса характеризуется разнообразием, а иногда и взаимной противоречивостью фигурирующих в литературе способов интерпретации расчетов и сделанных при этом физических выводов. Поэтому, прежде чем переходить к критическому обсуждению различных методических концепций и результатов, целесообразно изложить относящиеся к проблеме качественные соображения и строго установленные факты, вытекающие из неравновесной статистической механики.

Прежде всего отметим, что с общей точки зрения анализировать нагрев решетки с  $T_0 = 0$  при ударном сжатии в рамках механической модели неправомерно. Для оправдания подобного способа моделирования обычно привлекают [16] свойство стохастизации динамических систем без начальных флуктуаций, приводящее к распределению полученной ими энергии по различным степеням свободы. Однако на самом деле такое свойство строго формулируется на вероятностном уровне описания [18] и вовсе не обязательно для выделенной точки фазового пространства, которая отвечает начальным условиям типа (2), приводящим к вполне регулярному распределению физических величин.

Реальные системы подвергаются динамическому сжатию при  $T_0 \neq 0$  и имеют в начальном состоянии отличные от нуля значения смещений атомов и скорости их теплового движения  $u_{T_0}$ . Для этого случая, когда задача о трехмерной решетке уже не может быть полностью сведена к одномерной, в работах [7, 19] получены первые и к настоящему времени единственные строгие результаты в рамках статистического подхода. Основной чертой этого подхода является рассмотрение ансамбля систем, находящихся в макроскопически тождественных условиях, и задание (помимо уравнений движения) также функции распределения  $f$  (в квантовом случае статистического оператора).

Согласно формулировке [19], ударно-волновое сжатие рассматривается как результат эволюции неограниченного кристалла, который в начальный момент при  $t = 0$  находится в состоянии локального термодинамического равновесия с разрывом в распределении средней скорости. Далее для кристалла с потенциалом общего вида изучен средний по ансамблю профиль скорости и деформации в линейном по  $u_p$  приближении. В гармонической модели найденное решение оказывается точным в силу линейности уравнений движения и, обладая колебательной структурой, фактически воспроизводит результат, полученный в рамках механики [6], но для средних по ансамблю. Хотя при  $u_{T_0} = 0$  и наличии ангармонизма колебания еще более значительны, показано, что при совместном учете тепловой расфазировки в положениях и импульсах частиц и ангармонизма, приводящего к взаимодействию между модами, при значениях  $T_0$  порядка  $T_n$  (комнатной температуры) осцилляции отсутствуют.

Монотонность профиля связана с диссипативными процессами, в качестве которых в рассмотренном приближении выступают столкновения между квазичастицами — фононами. Здесь имеется определенная аналогия с ударными волнами в газе без внутренних степеней свободы [1], но следует иметь в виду, что само представление о квазичастицах в отличие от реальных частиц в газодинамике применимо лишь для случая предельно слабой неравновесности, достигаемой при  $u_p \rightarrow 0$ . При достаточно низких температурах, когда длина свободного пробега фононов  $L$  резко возрастает, изученное приближение приводит к бесстолкновительному режиму динамического сжатия, характеризуемому наличием колебаний, а также двухволновой конфигурацией, связанной со вторым звуком.

Полное микроскопическое описание процесса, определяемое зависимостью  $f$  от времени, оказывается возможным для гармонической модели. Здесь из-за громоздкости не приводятся формулы явного решения соответствующего уравнения Лиувилля [20]. Оно получается переходом по обычным формулам [15] к фононным переменным, последующем решении для них уравнений движения и использовании оператора эволюции [18], позволяющего при известных траекториях точек фазового пространства, параметризованного в данном случае фононными переменными, найти вид  $f(t)$ , а затем и средних значений от любых функций координат и импульсов. Иной способ определения этих величин продемонстрирован в работе [7] на примере цепочки гармонических осцилляторов, где смещение  $s_n$  представлялось в виде

$$s_n(t) = \langle s_n(t) \rangle + \delta s_n(t).$$

Уравнениям движения ввиду линейности удовлетворяют не только  $s_n(t)$ , но и средние по ансамблю  $\langle s_n(t) \rangle$  и флуктуационные компоненты  $\delta s_n(t)$ , причем  $\delta s_n(0)$ ,  $\delta \dot{s}_n(0)$  представляют собой случайные величины, распределенные, как в равновесном кристалле. В частности, должно выполняться равенство

$$\langle \{\delta \dot{s}_n(0)\}^2 \rangle = kT_0/m,$$

где  $k$  — постоянная Больцмана;  $m$  — масса частицы. В [7] показано, что в пренебрежении граничными эффектами для рассматриваемой модели мера интенсивности флуктуаций  $\langle \{\delta s_n(t)\}^2 \rangle$  постоянна, т. е. температура не зависит от времени, что вытекает и из точного решения для  $f(t)$  при произвольном гармоническом потенциале. К аналогичному результату, отвечающему тому, что вся энергия идет на деформацию решетки, приводит и расчет по соотношениям Гюгонио с помощью уравнения состояния гармонического кристалла. Таким образом, для указанной модельной системы строго доказывается, что, несмотря на наличие осцилляций, асимптотически при  $t \rightarrow \infty$  выполняются все соотношения Гюгонио. Физически при отсутствии ангармонизма постоянство температуры легко интерпретируется, так как нет связанной с взаимодействием между фононами перекачки энергии генерации волны в тепловую форму, а доля энергии, идущей на колебания, в силу быстрого спада их амплитуды (см. рис. 1, а) асимптотически стремится к нулю.

Для реалистических ангармонических моделей распределение энергии носит принципиально иной и более сложный характер: помимо возникающего теплового канала перекачки энергии ее конечная доля может тратиться на специфические для данной задачи детерминированные колебания, рассмотренные выше. Осцилляционный режим, а следовательно, и нарушение соотношений Гюгонио не реализуются, когда профиль качественно близок к монотонному решению, найденному в [19], что должно иметь место при достаточно малых амплитудах волны  $u_p \ll u_{то}$ . Это условие отвечает при комнатных значениях  $T_0$  амплитудам упругих предвестников, образующихся в традиционных динамических экспериментах.

При выполнении противоположного неравенства  $u_p \gg u_{т0}$  можно ожидать, по крайней мере для одномерной ангармонической решетки, возникновения осцилляционного профиля типа представленного на рис. 1, б, в. Дополнительным основанием для такого вывода служит установленная при численном анализе устойчивость отдельного солитона в цепочке Тода относительно достаточно малых флуктуаций начальных условий [4].

Для промежуточной между двумя предельными случаями области  $u_p \sim u_{т0}$  следует привлечь результаты этих же расчетов, которые показали, что после превышения начальной энергией тепловых флуктуаций некоторого порогового значения амплитуда и скорость солитона начинают спадать по мере его движения. Кроме того, для трехмерных решеток должна возникать дополнительная стохастизация, связанная с возникновением и последующим затуханием поперечных возмущений.

Таким образом, при учете начальной амплитуды  $T_0 \sim 300$  К решение задачи о микроструктуре ударной волны как для слабых волн, так и для диапазона  $u_p$  (км/с) должно значительно отклоняться от парадоксального результата механической модели. Однако аналитически описать последний режим методами неравновесной статистической механики пока не удалось, поэтому здесь важно развитие альтернативного динамического подхода.

### Метод молекулярной динамики

Сущность метода молекулярной динамики применительно к данной проблеме состоит в прямом решении на ЭВМ уравнений движения атомов при начальных условиях, моделирующих состояние термодинамического равновесия [21—29]. Точность результатов лимитируется в принципе тремя факторами — накапливающейся по мере движения волны погрешностью расчета на ЭВМ, конечным числом  $N$  атомов, включенных в расчет, и пренебрежением квантовыми эффектами. Поскольку расчетная схема может быть отработана путем сравнения с аналитически точно решаемым гармоническим случаем, а квантовые эффекты считаются существенными лишь при низких температурах, то на современном этапе наиболее важно значение  $N$ . Рекордная величина  $N = 1,25 \cdot 10^4$  достигнута в работах [21, 26], в других публикациях последнего времени оперировали с меньшими  $N$ :  $7,2 \cdot 10^3$  [22, 23],  $3 \cdot 10^3$  [25],  $2,6 \cdot 10^3$  [28, 29]. Обозначая число плоскостей, пройденных волной, через  $N_x$  и число атомов в плоскости —  $N_{\perp} = N/N_x$ , легко получить, что при прочих равных условиях затрачиваемое на прямой расчет машинное время изменяется  $\sim N_{\perp} N_x^2$ , что особенно ограничивает ресурсы увеличения  $N_x$ .

Специфика обсуждаемой задачи и ее отличие от обычного расчета термодинамических свойств равновесной системы состоит в том, что плоскости, рассматриваемые как целое, могут совершать колебательные движения с детерминированной фазой. Эта особенность, имеющая место при  $u_{т0} = 0$ , частично сохраняется и при  $u_{т0} \neq 0$ , вследствие чего следует рассматривать отдельную плоскость как подсистему, состоящую из  $N_{\perp}$  точек, находящихся в макроскопически тождественных условиях, и, следовательно, описываемую локальными макропараметрами. Такой подход, полностью отвечающий результатам строго статистического решения для гармонического кристалла, требует при своей реализации в рамках молекулярной динамики усреднения по каждой из плоскостей в отдельности, что эффективно лишь при достаточно больших  $N_{\perp}$ , так как даже при равновесии флуктуации имеют порядок малости  $(N_{\perp})^{-1/2}$ . В уже осуществленных расчетах предлагаемый подход не реализован, и во всех без исключения случаях приведены только результаты усреднения профиля по области, включавшей от 5 до 15 соседних плоскостей (рис. 3). При этом колебательная структура, если она и имела место, оказывалась невыявленной из-за усреднения и флуктуаций, имевших большую амплитуду, превышающую 10%: в выполненных до сих пор расчетах

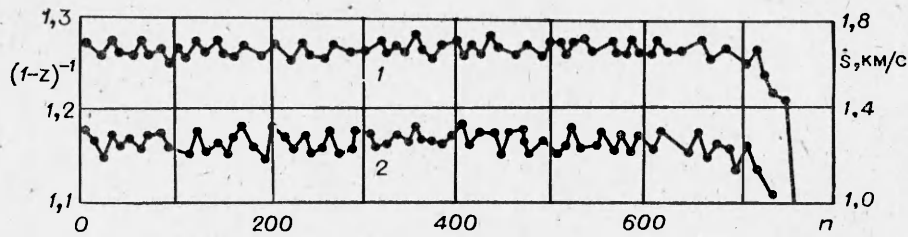


Рис. 3. Усредненный по десяти плоскостям профиль степени сжатия (1) и скорости (2) в молекулярно-динамическом расчете [22] для решетки железа.

$N_{\perp} \leq 25$ , из-за необходимости выбора специальных граничных условий эффективное значение  $N_{\perp}$  было еще ниже.

При максимальном использованном значении  $N_x = 800$  [23] остался по-прежнему невыясненным центральный вопрос о том, будут ли из-за взаимодействия с тепловыми флуктуациями затухать продольные колебания плоскостей или же их вклад существенно скажется на асимптотической стадии процесса. Решение этого вопроса требует значительного увеличения также и числа  $N_x$ , что предъявляет чрезвычайно высокие требования к используемым ЭВМ.

Необходимо указать, что при учете тепловых эффектов инициирование волны граничным условием типа (2) некорректно, так как в нем тепловое движение крайней плоскости не моделируется, что вызывает дополнительные трудности в интерпретации, оставшиеся без внимания авторов [21–27]. Этим трудностям можно избежать, рассматривая соударение двух кристаллов аналогично формулировке [19], либо задавая внешнюю силу, действующую на границу одного полуограниченного кристалла [28]. Кроме того, в большинстве работ отсутствует сопоставление с расчетами уравнения состояния модели и в лучшем случае приводятся лишь экспериментальные адиабаты моделируемой среды.

Обсудим также ряд вопросов, поднятых в дискуссии, завершившейся публикацией работ [23, 26]. Прежде всего приведем наиболее обоснованное, на наш взгляд, определение локальной, в общем случае анизотропной температуры как меры интенсивности теплового движения в плоскости  $n$  вдоль оси  $i$  в момент времени  $t$ :

$$T_n^i(t) = \frac{m}{k} [\langle \{\dot{s}_n^i(t)\}^2 \rangle - \langle \dot{s}_n^i(t) \rangle^2],$$

где усреднение проводится только по одной плоскости, что отличается от усреднения по времени или области, включающей несколько плоскостей [21–29]. В последнем случае из-за колебаний в сжатой области даже в механической модели появляется фиктивная температура [5, 16], причем в [21] область колебаний длиной  $l$ , удовлетворяющая условию (4), ошибочно интерпретировалась как зона тепловой релаксации, а ее задняя граница связывалась со вторым звуком. Процедура усреднения по большим пространственно-временным интервалам не позволяет корректно отделить хаотическое движение от упорядоченного, если последнее, как это имеет место в механической модели, характеризуется быстро изменяющейся функцией. Поскольку априори и при  $T_0 \neq 0$  нельзя гарантировать достаточно монотонного поведения средних по плоскости величин, то традиционный способ усреднения может привести к погрешностям, наиболее существенным вблизи фронта. Однако при моделировании явлений перестройки решетки и плавления на фронте ударной волны рекомендуемое плоскостное описание, будучи микроскопическим аналогом лагранжева подхода, становится непригодным и следует использовать эйлеровы переменные и методику аналитического слоя [28].

Переходя от методических аспектов непосредственно к обсуждению результатов молекулярно-динамических расчетов, подчеркнем, что про-



блему выполнения соотношений Гюгонио нельзя на сегодняшний день считать решенной однозначно. В работе [29] утверждалось, что в отличие от других исследователей ее автору удалось доказать стационарность волны. Если под стационарностью в соответствии с общепринятой терминологией [1, 3, 4] понимать зависимость решения во всей области только от автомодельной переменной  $na_0 - Dt$ , то фактически декламировалась и справедливость соотношений Гюгонио. На самом деле в [29] установлена всего лишь устойчивость переднего участка фронта относительно продольных возмущений. Но и в механической модели, для которой соотношения на разрыве нарушаются, такое свойство будет иметь место, так как оно вытекает из хорошо известного факта устойчивости отдельного солитона при изменении его формы [4].

В работе [21] сообщается о нарушении соотношений Гюгонио для волны, сжимающей вещество на 10%. При реализовавшихся в численном трехмерном расчете значениях  $u_p$  и  $D$ , определенные по этим соотношениям величины отличаются от соответствующих значений на хвосте сжатой области для деформации на 15%, а для напряжения — на 5%. В то же время, согласно [23], для модели с иным потенциалом, но при большей деформации рассогласование в первых двух соотношениях пренебрежимо мало и не превышает 3% для третьего соотношения. Подчеркнем, что здесь имеется в виду использование локальных значений макропараметров, а не средних по всей сжатой области, которые, как отмечалось в [26], должны автоматически удовлетворять соответствующим законам сохранения в интегральной форме.

Принципиальное отличие в выводах работ [26] и [23] связано с тем, что в первой из них начальная температура бралась достаточно низкой ( $T = 38$  К), а во второй — комнатной ( $T_0 = T_n$ ). В результате в [21, 26] фактически моделировался режим, близкий к случаю  $u_{\tau_0} = 0$ , характеризующийся отклонениями от соотношений Гюгонио. О влиянии тепловых эффектов на структуры волны свидетельствует и сопоставление данных [29] для профиля в твердом и жидком аргоне. Лишь в первом случае указано на наличие «стоячей волны» за фронтом, что полностью соответствует развиваемой в настоящей работе концепции, согласно которой подавление осцилляций происходит благодаря тепловому неупорядоченному движению, характерному для жидкости в намного большей степени.

Таким образом, при анализе обычных динамических экспериментов с  $T_0 \sim T_n$  более адекватными представляются выводы и аргументы в пользу применимости традиционного способа обработки ударно-волновых данных.

### Заключение

В предыдущих разделах рассмотрены обсуждавшиеся в литературе задачи микроскопической теории ударного сжатия кристаллов и по возможности установлены точки соприкосновения между отдельными результатами. Достигнутый к настоящему времени уровень еще не позволяет дать окончательные ответы на практически очень важные вопросы, связанные с описанием микроструктуры волны. Вместе с тем уже сейчас выкристаллизовались некоторые общие представления, которые могут служить базой для дальнейших более полных исследований проблемы.

В целом физическая картина динамического сжатия идеальных кристаллов выглядит следующим образом: на первом этапе образуется колебательный профиль типа изученного в механической модели, далее по мере расширения зоны сжатия в зависимости от параметров и в первую очередь от  $(u_{\tau_0}/u_p)$  либо характер профиля претерпевает слабые качественные изменения, приобретая структуру, близкую к солитонной, либо подобная структура полностью исчезает и возникает близкое к однородному распределение макропараметров за фронтом волны. В первом

низкотемпературном случае существуют весьма привлекательные принципиальные возможности экспериментального обнаружения осцилляций, например, с помощью дифракционных методов<sup>1</sup>.

Строгое теоретическое определение границ областей существования тех или иных режимов является очень сложной проблемой. Подобные задачи, связанные с условиями возникновения квазипорядоченного поведения в неравновесных системах с бесконечным числом степеней свободы, только начинают изучаться с общей точки зрения в рамках формирующегося в последние годы нового научного направления — синергетики [30]. Тем не менее для диапазона упругих предвестников, охватывающего обширную область динамических экспериментов, можно считать установленным, что диссипационные процессы, если начальная температура  $\sim 300$  К, являются доминирующими, а условия Гюгонио на разрывах справедливыми.

При больших амплитудах ударных волн численные эксперименты регистрируют на изученных стадиях движения несоблюдение в пределах нескольких процентов условий Гюгонио. Такой результат нельзя считать адекватно отражающим реальную, более сложную картину явления, поскольку математическое моделирование не описывает пока когерентных перестроек атомов, стабилизирующих стационарные режимы распространения ударных импульсов. Результатом перестроек является изотропизация решетки, т. е. переход от одномерной деформации атомных ячеек к равновесному квазигидростатическому состоянию объемного сжатия.

Качественно картина таких преобразований, зарождающихся на точечных дефектах, обнаружена и проанализирована в работах [31, 32] для условий статической одномерной деформации решетки из «нагретых» атомов с заданной функцией тепловых флуктуаций. Следует ожидать, что возникающие при распространении ударной волны, но отсутствующие в рассматриваемой в [32] модели неоднородности распределения массовой скорости интенсифицируют процесс перестройки решетки. Кроме того, в колебательном режиме динамического сжатия в передней части фронта при массовой скорости, равной  $2u_p$ , реализуются деформации, на много превышающие значение  $u_p/D$ , рассчитанное по (3). Согласно описанной выше картине, подобное явление имеет место по крайней мере в зоне соударения и может служить механизмом перескока атомов через потенциальные барьеры, стимулируя перестройку решетки и многочисленные эффекты, для которых статические и динамические давления, необходимые для их реализации, значительно разнятся. Здесь следует отметить двоякую роль, которую играют наличие дефектов и начальное тепловое движение: непосредственно способствуя проникновению через потенциальные барьеры, эти факторы в то же время нарушают периодичность решетки и связанную с ней колебательную структуру, облегчающую перескоки. Таким образом, зависимость параметров перехода от указанных факторов может стать весьма нетривиальной.

Изотропизация решетки при ударном сжатии еще не осуществлена в численном эксперименте, но этот рубеж будет, по-видимому, в скором времени достигнут. Относительно применения уже выполненных расчетов к реальным кристаллам и амплитудам выше упругого предела Гюгонио можно высказать следующие эвристические утверждения:

— полученные в этих расчетах значения ширины фронта  $\Delta$  от нескольких единиц до нескольких десятков межатомных расстояний (см. рис. 3) являются нижней оценкой реального значения  $\Delta$ , поскольку перестройка решетки затягивает фронт;

— наблюдаемые отличия от соотношений Гюгонио до нескольких процентов служат верхней оценкой истинного отклонения, так как оставшиеся неучтенными при моделировании процессы перестройки

<sup>1</sup> На это обстоятельство автору указал Я. Б. Зельдович.

преимущественно разрушают колебательную структуру, благодаря которой, как показано в настоящей работе, и становится возможным само нарушение соотношений на разрыве.

Помимо проблемы конфигурационных преобразований решеток во фронте волны другими актуальными задачами являются:

— детальный анализ асимптотического режима в механической модели при больших амплитудах с целью выяснения вопроса о стохастизации, типа обнаруженной в [16];

— систематические расчеты в одномерной цепочке с различными  $T_0$  для определения границы перехода от колебательного профиля к монотонному;

— численное моделирование в трехмерных решетках для  $N \approx 10^5$  при корректном задании ударной волны и процедуры усреднения и последующее сопоставление параметров ударного сжатия с результатами непосредственного молекулярно-динамического расчета уравнения состояния моделируемой среды.

Поступила в редакцию 20/IV 1982

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматгиз, 1963.
2. D. H. Tsai, C. W. Beckett. J. Geoph. Res., 1966, 71, 10.
3. Л. В. Альтшулер. УФН, 1965, 85, 2.
4. Солитоны в действии/Под ред. К. Лонгрена и Э. Скотта. М.: Мир, 1981.
5. B. L. Holain, G. K. Straub. Phys. Rev., 1978, В 18, 4.
6. А. Н. Лузин. ЖЭТФ, 1966, 50, 4.
7. Е. А. Дынин, Б. С. Лукьянчук.— В кн.: Докл. I Всесоюз. симпозиума по импульсным давлениям. Т. 1. М., 1974.
8. Е. А. Дынин. ФТТ, 1974, 16, 11.
9. В. Е. Захаров и др. Теория солитонов. М.: Наука, 1980.
10. G. E. Duvall, R. Manvi, S. C. Lowell. J. Appl. Phys., 1969, 40, 9.
11. R. Manvi, G. E. Duvall, S. C. Lowell. Int J. Mech. Sci., 1969, 11, 1.
12. J. Tasi. J. Appl. Phys., 1972, 43, 10.
13. J. Tasi. J. Appl. Phys., 1973, 44, 10.
14. J. Tasi. J. Appl. Phys., 1980, 51, 11.
15. А. М. Косевич. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972.
16. T. Hill, L. Knorof. J. Geoph. Res., 1980, В 85, 12.
17. А. Н. Лузин, А. В. Попов.— В кн.: Докл. I Всесоюз. симпозиума по импульсным давлениям. Т. 1. М., 1974.
18. Дж. Уленбек, Дж. Форд. Лекции по статистической механике. М.: Мир, 1965.
19. Е. А. Дынин. ТМФ, 1975, 24, 3.
20. Е. А. Дынин. Канд. дис. М., 1978.
21. D. H. Tsai, B. A. Mac Donald. High Temp. High Pres., 1976, 8, 4.
22. A. Paskin, A. Cohar, G. J. Dienes. J. Phys., 1977, С 10, 19.
23. A. Paskin, A. Cohar, G. J. Dienes. J. Phys., 1978, С 11, 21.
24. J. Batteh, J. D. Powell. J. Appl. Phys., 1978, 49, 7.
25. J. D. Powell, J. Batteh. J. Appl. Phys., 1980, 51, 4.
26. D. H. Tsai, B. A. Mac Donald. J. Phys., 1978, С 11, 9.
27. G. K. Straub, B. L. Holain, R. G. Petschek. Phys. Rev., 1979, В 19, 8.
28. В. Ю. Клименко, А. Н. Дремин. Докл. АН СССР, 1980, 251, 6.
29. В. Ю. Клименко. Автореф. дис. Черноголовка, 1981.
30. Г. Хакен. Синергетика. М.: Мир, 1980.
31. М. А. Могилевский, В. В. Ефремов, И. О. Мынкин. ФГВ, 1977, 13, 5.
32. М. А. Могилевский, И. О. Мынкин. ФГВ, 1978, 14, 5.

#### ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ

А. А. Васильев  
(Новосибирск)

Результатом многочисленных исследований, посвященных проблеме инициирования газовой детонации, явилось создание в последнее время нескольких приближенных моделей [1—3], позволяющих описать неко-