

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛА ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

С. Ю. Коростелев, С. Г. Псахье, В. Е. Панин

(Томск)

Понимание микроскопических механизмов процессов, происходящих при распространении ударной волны (УВ) в материалах, расширяет возможности практического использования различного рода высокоэнергетических воздействий на структуру и свойства твердых тел. Поэтому изучению поведения атомной подсистемы в таких условиях посвящено большое количество работ, основанных на методе молекулярной динамики. В настоящее время при численном моделировании распространения УВ в твердых телах основное внимание уделяется изучению средних по ансамблю характеристик материала, таких как кинетическая энергия, давление и т. п. [1—4]. Вместе с тем относительно малоизученными остаются изменения атомной структуры во фронте и за фронтом УВ. В работе [5] исследовано влияние тепловых флуктуаций и точечных дефектов на развитие пластической деформации при сильном одномерном сжатии решетки.

Следует отметить, что в [1—5] моделируется плоский фронт УВ. В реальных же материалах вследствие неоднородности структуры (границы зерен, включения, области скопления дефектов и т. д.) возникают искажения плоской формы фронта, приводящие к неоднородному распределению нагрузки, что может существенно влиять на характер поведения материала [6, 7]. В то же время при численном моделировании высокоскоростного импульсного нагружения эта сторона вопроса практически не изучалась. Цель настоящей работы — исследование поведения атомной подсистемы при распространении УВ с неплоским фронтом.

Для моделирования использовался кристаллит α -Fe, представляющий собой прямоугоньную область на плоскости (110), содержащую $\sim 10^4$ атомов. Ударная волна инициировалась в направлении $\langle 110 \rangle$. Межатомной подсистемы при распространении УВ с неплоским фронтом.

Эволюция рассматриваемой системы из N атомов во времени описывалась уравнениями движения

$$\frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\frac{1}{m_i} \sum_{i \neq j} \left[\frac{d\varphi(r)}{dr} \right]_{r=r_{ij}} \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{r_{ij}}, \quad (1)$$

где \vec{r}_i и m_i — радиус-вектор и масса i -го атома; $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$; $\varphi(r)$ — потенциал межатомного взаимодействия. Суммирование ведется в области взаимодействия i -го атома. Для учета взаимодействия рассматриваемого кристаллита с окружением полагалось, что на атомы граничного слоя действуют дополнительные силы \vec{F}^d , величина и направление которых определяются в начальный момент времени из условия равенства нулю результирующей силы.

Обычно для инициирования УВ полагается, что атомы на одной из граней кристаллита движутся с некоторой постоянной скоростью \vec{v} (граничное условие типа I), тогда уравнение (1) для этих атомов принимает вид

$$\frac{d^2 \vec{r}_n}{dt^2} = 0, \quad \frac{d\vec{r}_n}{dt} = \vec{v},$$

$$\frac{d^2 \vec{r}_k}{dt^2} = \frac{1}{m_k} \left\{ -\sum_{i \neq j} \left[\frac{d\varphi(r)}{dr} \right]_{r=r_{ij}} \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{r_{ij}} + \vec{F}_k^d \right\},$$

$k \neq n,$

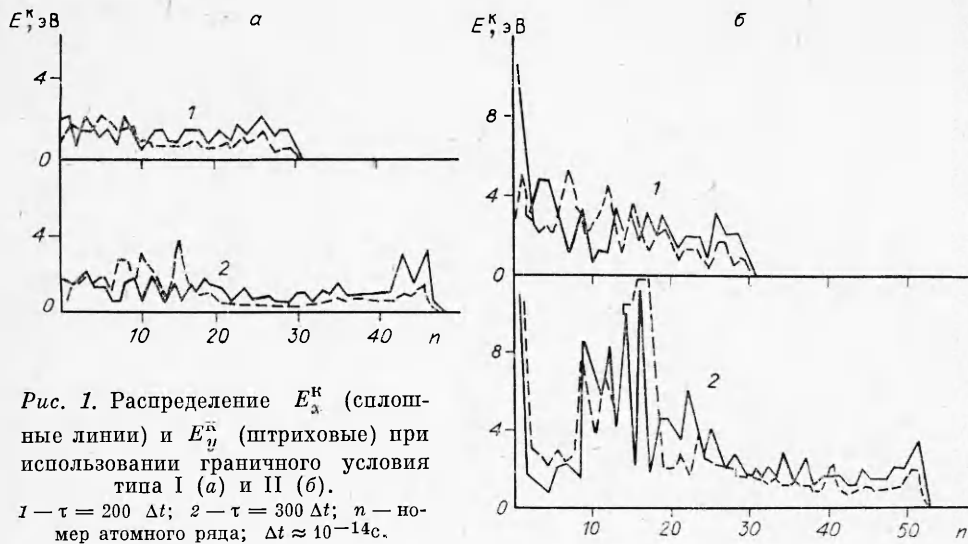


Рис. 1. Распределение E_x^k (сплошные линии) и E_y^k (штриховые) при использовании граничного условия типа I (а) и II (б).
 1 — $\tau = 200 \Delta t$; 2 — $\tau = 300 \Delta t$; n — номер атомного ряда; $\Delta t \approx 10^{-14}$ с.

индекс n — номер атомов, находящихся под нагрузкой; k — номер атомов граничного слоя. В то же время, как отмечалось в [9], физически более корректен способ инициирования УВ, когда задаются некоторые внешние силы \vec{F}^{ex} , действующие на выбранные атомы (граничное условие типа II), поэтому (1) для атомов граничного слоя запишется в виде

$$\frac{d^2 \vec{r}_k}{dt^2} = \frac{1}{m_i} \left\{ - \sum_{i \neq j} \left[\frac{d\varphi}{dr} \right]_{r=r_{ij}} \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{r_{ij}} + \vec{F}_k^d + \sum_n c_{kin} \vec{F}_n^{ex} \right\}.$$

Здесь $\delta_{kn} = \begin{cases} 1, & k = n, \\ 0, & k \neq n. \end{cases}$

Непловая форма фронта ударной волны формировалась двумя способами: а) иницированием УВ, в отличие от традиционного подхода, не на всей граничной плоскости, а локально, на некоторой ее части; б) искажением плоской формы фронта вследствие его взаимодействия с включением из двухсот атомов с массой $m = 2m_0$ (m_0 — масса атома матрицы). В целях сокращения времени расчетов на ЭВМ невозмущенная область кристаллита исключалась из рассмотрения, при этом использовался алгоритм, аналогичный предложенному в [1]. В работе применялась атомная система единиц, в которой заряд и масса электрона, постоянная Планка \hbar и борковский радиус равны единице [10].

Распределение кинетической энергии в направлении распространения УВ [1–3] — важная характеристика структуры фронта. Влияние же граничных условий на эту зависимость в литературе не исследовалось, поэтому в настоящей работе вычисления для случая локального нагружения проведены с использованием граничных условий типов I и II. Результаты расчетов приведены на рис. 1. Видно, что результаты аналогичны полученным в работах [1, 2]. В передней части фронта находится устойчивый пик кинетической энергии E^k , существование которого отмечалось в [1, 4]. Далее следует область, в которой величины $E_x^k = -mv_x^2/2$ и $E_y^k = mv_y^2/2$ незначительно отличаются друг от друга. Затем возникает так называемая «неустойчивая» область, характеризующаяся возрастанием средней кинетической энергии. Из рис. 1, а следует, что при использовании граничного условия I в зоне «неустойчивости» значение E_y^k в 1,5–2 раза превосходит E_x^k . Это обусловлено локальностью начального возмущения, поскольку при использовании граничных условий типа I релаксации в рассматриваемой области затруднены, что ведет к возрастанию y -й компоненты скоростей атомов.

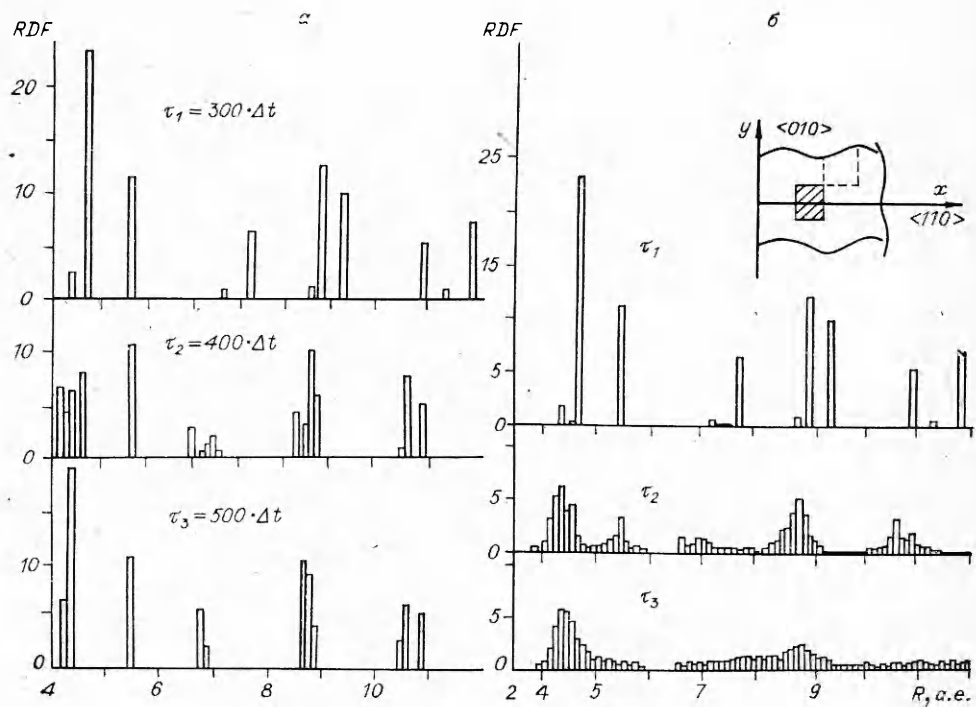


Рис. 2. Функция радиального распределения атомов в идеальном кристалле (а) и в кристалле с включениями (б) для различных моментов времени. На схеме штриховой линией ограничена область вычисления RDF , заштрихована область с $m = 2m_0$.

Из сравнения рис. 1, а, б видно, что при использовании граничных условий типа II в области «неустойчивости» имеет место более резкое увеличение величин E_x^k и E_y^k , поскольку граничные условия типа II допускают более эффективную по сравнению с типом I релаксацию возникающих напряжений.

Для анализа изменений атомной структуры в различных областях кристаллита рассчитывалась функция радиального распределения RDF в различные моменты времени. Результаты, полученные при распространении плоского фронта УВ в идеальном кристалле, приведены на рис. 2, а для различных моментов времени ($\Delta t \approx 10^{-14}$ с). Видно, что при прохождении фронта УВ в рассматриваемой области несколько размываются характерные для кристалла δ -пики RDF . В дальнейшем вид функции радиального распределения практически восстанавливается, но происходит «смещение» пиков относительно идеальной структуры, что обусловлено характером нагружения, причем пик при $R = 5,4$ а.е. не изменяется, поскольку соответствует атомам, расположенным в направлении $\langle 010 \rangle$, нормальном направлению распространения ударной волны.

При искажении плоской формы фронта УВ вследствие взаимодействия с включениями (см. схему на рис. 2, б) значение RDF существенно трансформируется. Происходит сильное размытие пиков, и RDF становится практически непрерывной, причем, в отличие от идеального кристалла, структура материала в дальнейшем не восстанавливается даже качественно.

В случае неплоского фронта УВ, обусловленного локальным нагружением, проведен анализ смещений атомов. Траектории движения атомов для некоторой выбранной части кристаллита приведены на рис. 3. Видно, что сформировались две характерные зоны: в I имеют место сильные смещения атомов, в II атомы совершают колебательные движения. Вычисления RDF проведены в обеих областях, причем если в об-

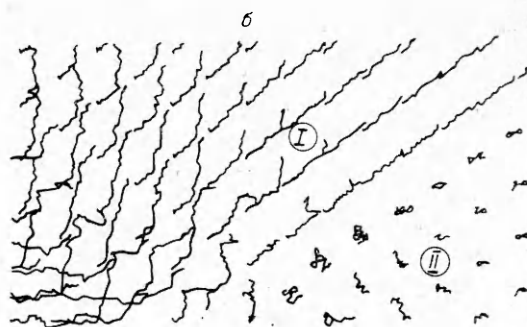
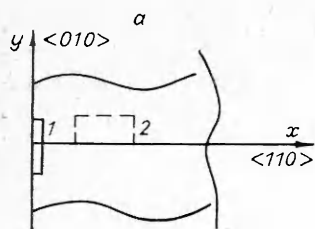


Рис. 3. Схема нагружения кристаллита (а) и траектории движения атомов из области 2 (б).
1 — область инициирования ударной волны; 2 — область исследования траекторий движения атомов.

ласти II наблюдается лишь незначительное размытие δ -пиков, то в I функция радиального распределения практически непрерывна.

Из сопоставления полученного распределения кинетической энергии в кристаллите и изменения атомной структуры материала при распространении УВ следует, что область «неустойчивости» на рис. 1 соответствует зонам структурной перестройки атомной подсистемы. Аналогичное заключение можно сделать из результатов, полученных в [1], с той разницей, что сильные смещения атомов обусловлены не формой фронта УВ, а его взаимодействием с флуктуациями тепловых колебаний атомов. Наряду с этим нарушение плоской формы фронта УВ, как видно из рис. 3, может привести к микрофрагментации в соответствующих областях кристаллита.

Изучение особенностей структурной перестройки показало, что при распространении неплоского фронта УВ функция радиального распределения атомов теряет дискретный, характерный для кристалла вид и становится непрерывной. Следует ожидать, что при достаточно быстром снятии нагрузки такая структура может быть «заморожена», что будет проявляться на электронограмме в виде характерных диффузных колец.

ЛИТЕРАТУРА

1. Tsai D. H., McDonald R. A. High Temp. High Press., 1976, 8, 4, 403.
2. Paskin A., Gohar A., Dienes G. J. J. Phys. Chem. Solids, 1978, 39, 12, 1307.
3. Клименко В. Ю., Дремин А. Н. Докл. АН СССР, 1980, 251, 6, 1379.
4. Powel J. D., Bettah J. H. J. Appl. Phys., 1980, 51, 4, 2050.
5. Могилевский М. А., Мышкин И. О. ФГВ, 1985, 21, 3, 113.
6. Karo A. M.— In: Shock waves in condensed matter.— N. Y., 1982.
7. Псахье С. Г., Коростелев С. Ю., Панин В. Е. 9-я Международная конференция по высокоэнергетическому воздействию на вещества.— Новосибирск, 1986.
8. Johnson V. A. Phys. Rev., 1964, A134, 1329.
9. Дынин Е. А. ФГВ, 1983, 19, 1, 111.
10. Сена Л. А. Единицы физических величин и их размерности.— М.: Наука, 1977.

Поступила в редакцию 26/III 1987,
после доработки — 15/VI 1987

ИЗЛУЧЕНИЕ УДАРНО-СЖАТЫХ ГАЛОГЕНПРОИЗВОДНЫХ МЕТАНА

М. Ф. Гоголя, И. М. Воскобойников

(Москва)

В настоящее время широкие исследования свойств конденсированных веществ при высоких давлениях p и температурах T не могут ограничиваться только измерениями кинематических параметров ударной волны (УВ), т. е. ее скорости D и массовой скорости u , на основе кото-