$T_0 \approx 1015$ К решение со взрывным процессом второго типа становится глобально неустойчивым. Подобные ситуации характерны для так называемых «синергетических» систем [9].

Таким образом, показано, что в неоднородных реакционноспособных системах при известных условиях могут возникать взрывные процессы. Малые геометрические размеры газофазных неоднородностей, требуемые для образования достаточно сильных волн давления в объемах, указывают на то, что механизм рождения нелинейных возмущений как в гомогенных, так и в гетерогенных смесях, по-видимому, обусловлен схемой, предложенной в [4].

Капли горючего могут повлиять на распространение взрывной волны, поскольку в окрестности капель, как правило, имеются градиенты температуры и концентрации газофазной смеси. Для дальнейшего развития модели необходимо рассмотреть закономерности образования и распространения конечных возмущений давления в условиях распределенных неоднородностей температуры и состава смеси. Однако следует иметь в виду, что одномерное распространение детонационной волны неустойчиво и сопровождается пульсациями параметров (см. рис. 3, 4). В проведенных расчетах рассматривалась изолированная неоднородность температуры и концентрации, поэтому выделение перечисленных выше типов взрывных процессов на фоне таких пульсаций не представляло трудностей. На этапе взаимодействия волн давления и реакции пульсации усиливались, а при их рассогласовании ослабевали.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Харрье Д. Т., Рирдон Ф. Г.** Неустойчивость горения в ЖРД.— М.: Мир, 1975.
2. **Лернер М. О.** Химические регуляторы горения моторных топлив.— М.: Химия, 1979.
3. **Ragland K. W., Dabora E. K., Nicholls J. A.** Phys. Fluids, 1968, 11, 11, 2377.
4. **Зельдович Я. Б., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. и др.** ПМТФ, 1970, 2, 76.
5. **Lee J. H., Knystautas R., Yoshikawa N.** Acta Astronautica, 1978, 5, 971.
6. **Гельфанд Б. Е., Поленов А. Н., Фролов С. М. и др.** ФГВ, 1985, 21, 4, 118.
7. **Barthel H. O., Strehlow R. A.** AIAA Paper N 79-0286, 1979.
8. **Рихтмайер Р., Мортон К.** Разностные методы решения краевых задач.— М.: Мир, 1972.
9. **Гленсдорф Г., Пригожин И.** Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций.— М.: Мир, 1973.

Поступила в редакцию 26/IV 1988

О ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ КРИСТАЛЛА В УСЛОВИЯХ УДАРНО-ВОЛНОВОГО НАГРУЖЕНИЯ

М. А. Могилевский, И. О. Мынкин

(Новосибирск)

Уровень касательных напряжений на фронте плоской стационарной ударной волны (УВ) может быть оценен методом Кована из адиабаты Гюгонио [1]. В диапазоне давлений УВ в несколько десятков гигапаскалей касательные напряжения во много раз превышают предел текучести в нормальных условиях деформирования. Согласно оценке [1], в меди уровень касательных напряжений на фронте УВ 26 ГПа превышает теоретическую прочность, что дает основание предложить модели «сверхкритического сдвига» [1] и другие специфические механизмы пластической деформации при ударно-волновом нагружении (дислокационная стенка Смита [2], схема Майерса [3] и др.). Однако структурные исследования [2, 4, 5] монокристаллов меди и других металлов, подвергнутых ударно-волновому нагружению в диапазоне давлений до 60—80 ГПа, не выявили признаков реализации «сверхкритического сдвига». При численном моделировании поведения холодной бездефектной кристаллической решетки в условиях сильного одномерного сжатия, характерного для деформации на фронте плоской УВ, сжатие до 100 ГПа было упругим [4, 6]. Указанные противоречия стимулировали проведение исследования зависимости теоретической прочности кристаллической решетки от характера нагружения.

Понятие теоретическая прочность на сдвиг введено Френкелем [7]. В простейшем предположении о гармоническом законе изменения напряжения сдвига со смещением двух жестких рядов атомов в [7] получена оценка предельного напряжения, которое может выдерживать решетка, $Gb/2\pi h$, где G — модуль сдвига; b — межатомное расстояние в направлении сдвига; h — расстояние между рядами атомов. Для ГЦК металлов теоретическая прочность $\sim$G/9 [7]. Обычно используется уточненная оценка Маккензи [8] $G/25$, полученная с учетом расщепления сдвига плотноупакованных плоскостей {111} в направлении $\langle 1\bar{1}0\rangle$ на последовательные «частичные» сдвиги в направлениях $\langle 2\bar{1}\bar{1}\rangle$ и $\langle \bar{1}2\bar{1}\rangle$, но также при довольно искусственной зависимости потенциальной энергии от смещения (три члена разложения в ряд Фурье).

Расчеты проводились для плоской плотноупакованной решетки с парным потенциалом взаимодействия атомов в виде кусочно-степенной функции. Учитывались взаимодействия до третьего соседа. Коэффициенты подбирались так, чтобы удовлетворить следующим экспериментальным характеристикам меди: нулевое давление в холодной решетке при равновесном расстоянии между ближайшими соседями, точки на нулевой изотерме сжатия 30 и 50 ГПа, модуль всестороннего сжатия 150 ГПа, энергия дефекта упаковки 45 мДж/м^2, эффективная энергия сублимации 1,75 эВ. Ранее с этим потенциалом исследованы активационный характер зарождения сдвигов в одномерно сжатой решетке [6] и развитие пластической деформации на последовательных стадиях ударно-волнового нагружения [9].

Исследовалась кристаллическая решетка, все атомы которой находились в кристаллографических узлах. Решетка подвергалась однородной деформации сдвига, растяжения или сжатия (следовательно, все узлы идентичны). Для описания напряженного состояния достаточно было рассчитать силы взаимодействия одного из атомов (помещенного в начало координат) со всеми его соседями, входящими в сферу действия потенциала. При потенциале взаимодействия $\varphi(r)$ энергия, приходящаяся на этот атом, $U = \sum\limits_{i, x_i > 0} \varphi(r_i)$ (i — номер атома, попадающего в сферу действия потенциала; $r_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}$; x_i, y_i, z_i — координаты i-го атома, в плоском случае $z_i = 0$). По определению, $\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}}$ имеем

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{V_0} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{xx}} \sum_{i, x_i > 0} \varphi(r_i) = \frac{1}{V_0} \sum_{i, x_i > 0} - F(r_i) \frac{\partial r_i}{\partial \varepsilon_{xx}} = -\frac{1}{V_0} \sum_{i, x_i > 0} F(r_i) \frac{x_i^2}{r_i},$$

где V_0 — объем элементарной ячейки; сила $F(r) = -\frac{d\varphi}{dr}$. Аналогично $\sigma_{xy} = -\frac{1}{V_0} \sum\limits_{i, x_i > 0} F(r_i) \frac{x_i y_i}{r_i}$.

В табл. 1 систематизированы результаты расчетов критических деформаций и напряжений при различных видах деформации плоской кристаллической решетки меди при нулевой температуре. Обозначения: ε_n и p_n — деформация решетки и нормальное напряжение в направлении, перпендикулярном плоскости сдвига; ε_t и p_t — то же в боковом направлении; γ^* и ε^* — предельные деформации сдвига и растяжения (со знаком минус) или сжатия (+), при которых решетка теряет устойчивость; $\tau_{\langle 1\bar{1}0\rangle}$ — уровень касательных напряжений в плотноупакованном направлении $\langle 1\bar{1}0\rangle$; G и E — упругие модули (с индексом 0 — в ненагруженном состоянии).

Таблица 1

Вид нагружения	$\mathrm{tg}\,\gamma^*$	ε_n^*	p_n, ГПа	$\tau\,(1\bar{1}0)$, ГПа	G, ГПа	$\frac{\tau}{G}$	E, ГПа	$\frac{p_n}{E}$
Сдвиг при $\varepsilon_n=\varepsilon_t=0$	0,229	0	35,5	18,2	112	1/6	—	—
$p_n=p_t=0$	0,102	−0,024	0	6,55	112	1/17	—	—
$p=-10$ ГПа	0,090	—	−10	4,93	97,9	1/20	—	—
$p=$ 10 ГПа	0,111	—	10	8,78	132	1/15	—	—
$p=$ 30 ГПа	0,137	—	30	14,4	173	1/12	—	—
$p=$ 60 ГПа	0,194	—	60	23,8	178	2/15	—	—
Растяжение при $p_t=0, \langle\bar{1}01\rangle$	—	−0,06	−9,72 *	4,38	—	—	274	1/28
$\langle 11\bar{2}\rangle$	—	−0,16	−38,7 *	15,4	—	—	300	1/7
$\varepsilon_t=0, \langle\bar{1}01\rangle$	—	−0,13	−28,2	4,58 *	112	1/24	—	—
$\langle 11\bar{2}\rangle$	—	−0,07	−22,3 *	7,79	—	—	328	1/15
Сжатие при $p_t=0$, $\langle 11\bar{2}\rangle$	—	0,068	15,9	7,29	112	1/15	—	—
$\varepsilon_t=0, \langle 11\bar{2}\rangle$	—	0,25	208	54,9	112	1/2	—	—

Сдвиг. В случае чистого сдвига (отсутствие нормальных напряжений на гранях деформируемого параллелепипеда, $p_n=p_t=0$) теоретическая прочность плоской решетки меди $G/17$. Поскольку сдвиг в решетке происходит непосредственно в направлении плотной упаковки $\langle 1\bar{1}0\rangle$, а в трехмерном кристалле — при не очень высокой энергии дефекта упаковки, зигзагообразный характер процесса сдвига по межатомным ямам в низлежащей плоскости {111} снижает барьер, согласие с оценкой Маккензи $G/25$ можно считать достаточно хорошим. Сдвиг при фиксированном расстоянии между смещаемыми плоскостями ($\varepsilon_n=\varepsilon_t=0$) приводит к резкому возрастанию нормального давления и, как следствие, к существенно более высокому значению теоретической прочности.

Влияние всестороннего давления на теоретическую сдвиговую прочность. Уменьшение межатомных расстояний с давлением приводит вследствие нелинейности зависимости силы взаимодействия атомов от расстояния к быстрому росту теоретической прочности. При $p=0$ $\frac{d\tau}{dp}=0{,}17$, что в 3 раза меньше оценки, полученной для KCl [8]. В легкодоступном для экспериментальных исследований диапазоне $p\leqslant 60$ ГПа уровень теоретической прочности возрастает в 3,6 раза. Расчеты показывают заметный рост с давлением отношения теоретической прочности к модулю сдвига (при гармоническом потенциале $\tau\infty G$ [1]).

Растяжение. Откол. При растяжении потеря устойчивости решетки происходит либо посредством отрыва, либо в результате достижения предельной прочности на сдвиг в наклонных благоприятно ориентированных плоскостях. В данных расчетах при растяжении тонкого стержня ($p_t=0$) разрушение происходило отрывом при направлении оси растяжения $\langle\bar{1}01\rangle$ и $\langle 11\bar{2}\rangle$, а критические растягивающие напряжения составили соответственно 1/28 и 1/7 модуля упругости E, т. е. существенно зависели от направления.

Второй тип расчета — растяжение при фиксированном поперечном размере деформируемого элемента ($\varepsilon_t=0$) — соответствует случаю откола при нагружении плоскими ударными волнами. На полученных из экспериментов зависимостях разрушающего напряжения от времени приложения нагрузки наблюдается излом при переходе от квазистатических к откольным разрушениям, что связывается с зарождением разрушения под действием напряжений порядка теоретической прочности [10]. Характер потери устойчивости решетки при отколе в расчетах оказался зависящим от направления оси приложения растягивающих напряжений: ось $\langle 11\bar{2}\rangle$ — разрушение отрывом ($p_n = E/15$), ось $\langle \bar{1}01\rangle$ — достижение теоретической прочности на сдвиг раньше, чем на отрыв ($\tau = G/24$). В последнем случае возникновению зародышевой трещины должно предшествовать достаточно интенсивное скольжение. В настоящих расчетах плоской решетки использовался потенциал межатомного взаимодействия с несколько заниженной энергией потенциальной ямы. По-видимому, в материалах, характеризуемых большей силой связи (большей энергией сублимации), при растяжении теоретическая прочность на сдвиг будет достигаться раньше, чем на отрыв. На такое соотношение теоретических прочностей указывают результаты экспериментов по растяжению усов [8].

Одномерное сжатие при фиксированном поперечном размере деформируемого элемента ($\varepsilon_t = 0$) характерно для напряженного состояния в твердом теле на фронте плоской УВ [1]. Именно в такой постановке эксперимента возможно исследовать поведение материалов при предельно высоких касательных напряжениях. Одномерный характер сжатия приводит в резкому возрастанию сил взаимодействия между атомами, вследствие чего повышается теоретическая прочность на сдвиг. В рассматриваемом случае плоской решетки устойчивость сохраняется вплоть до давления в направлении одномерного сжатия 200 ГПа, величина критического сдвигового напряжения при этом в 8 раз превышает теоретическую прочность на чистый сдвиг при нулевом давлении. Таким образом, уточнение оценки теоретической прочности на сдвиг в условиях одномерного сжатия отодвигает критический уровень давления плоской УВ, при котором следовало бы ожидать появления катастрофических структурных изменений, от 26 ГПа, как предполагалось в [1], до $\sim$200 ГПа (в настоящее время величина критического давления в УВ в меди уточняется расчетами трехмерной решетки с различными потенциалами межатомного взаимодействия). Следовательно, в диапазоне нагружений до 50—100 ГПа, представляющем интерес для взрывной обработки материалов, пластическая деформация в металлах развивается в докритических условиях. И основные особенности механизма деформации, как это следует из эксперимента [2, 4], состоят в зарождении и развитии сдвигов при высоких напряжениях, но все же не достигающих теоретической прочности.

Влияние температуры на теоретическую прочность. Сравнение результатов последних расчетов с полученными в [6, 9] при анализе поведения решетки в условиях сильного одномерного сжатия позволяет сделать ряд принципиально важных выводов. В [6] проводился расчет методом молекулярной динамики постепенного одномерного сжатия плоской решетки из 500 атомов. Повышение температуры T от нуля до 300 К приводило к уменьшению критического уровня касательных напряжений от 54,9 до 43,0 ГПа, а величина нормальных напряжений в направлении сжатия снизилась от 205 до 150 ГПа. При обсуждении влияния температуры на теоретическую прочность обычно используется оценка Франка энергии активации для зарождения в поле напряжений τ дислокационной петли [8]. В работе [6] наблюдались последовательные стадии зарождения сдвига в одномерно сжатой решетке от разрыва одной из плоскостей $\{\bar{1}10\}$ до образования двух расщепленных дислокаций противоположного знака (дислокационной петли).

Специальные исследования проведены также с целью выяснения природы «горячей точки» в одномерно сжатом кристалле, где зарождается сдвиг [11]. Показано, что тепловые смещения атомов из кристаллографических узлов скоррелированы. Поперечный размер областей согласованных смещений практически не зависит от температуры и величины всестороннего сжатия и составляет 5—6 атомов. «Горячая точка», где в некоторый момент происходит зарождение дефекта в нагруженной или сильно нагретой решетке, представляет собой участок кристалла с бла-

Таблица 2

$\frac{r}{r_0}$	$\dot{\varepsilon}\cdot 10^{-10}$, c^{-1}	$\frac{\Delta h}{h_0}$, %	p_n, ГПа	τ, ГПа
1,0	2,5	21	150	43
1,1	2,5	15	90	23
1,2	2,5	11,5	60	14
1,3	1,25	8,5	42	10,5
1,4	1,25	3,8	16	3,2
1,5	0,625	1,5	9	1,0
0	2,5	8,4	40	9,8

гоприятно ориентированными областями согласованных смещений. При зарождении сдвига в одномерно сжатой решетке две соседние области согласованных смещений были сдвинуты в противоположных направлениях вдоль $\langle \bar{1}10 \rangle$.

Влияние точечных дефектов на напряжение течения бездислокационного кристалла при одноосном сжатии. Этот эффект также исследовался методом молекулярной динамики на участке плоской плотноупакованной решетки меди из 500 атомов, содержащей один атом заданного радиуса ($r/r_0 = 0$ соответствует вакансии) при сильном одномерном сжатии. Результаты расчетов при $T = 300$ К критических значений уровня касательных напряжений τ и нормального давления p_n в состоянии, при котором начиналось зарождение сдвига, приведены в табл. 2 ($\varepsilon = \Delta h/h_0$ — критическая деформация сжатия; $\dot{\varepsilon}$ — скорость одномерного сжатия в расчете).

В окрестности межузельного атома в одном из ранних расчетов с потенциалом Борна — Майера [4] также отмечалось зарождение сдвига при существенно меньшей деформации одномерного сжатия, чем в бездефектной решетке. Естественно, что комплексы точечных дефектов могут быть более эффективными центрами зарождения сдвигов, чем одиночные дефекты. В расчете [9] показано, что на парном дефекте из атомов замещения с $r/r_0 = 1{,}2$, $T = 300$ К сдвиг зародился при одномерном сжатии на 7,8 % и $\tau \approx 8$ ГПа (на одиночном атоме зарождение сдвига при значениях соответственно 11,5 % и 14 ГПа).

Вакансии, межузельные атомы и их комплексы являются термодинамически равновесными дефектами. Отсюда следует, что теоретическую прочность бездислокационного кристалла в условиях заданного напряженного состояния при $T \neq 0$ (такое расширение понятия «теоретическая прочность» широко используется в литературе [1, 8]) нужно определять по критическим условиям потери устойчивости решетки в окрестности наиболее эффективного комплекса точечных дефектов. Влияние комплексов примесных частиц на зарождение дислокаций в кристаллах LiF показано экспериментами по исследованию затухания упругого предвестника [12].

На основании изложенного можно сделать следующие выводы.

1. Теоретическая прочность холодной кристаллической решетки определяется видом напряженного состояния.

2. При сильном одномерном сжатии на фронте плоской ударной волны решетка меди теряет устойчивость лишь в мегабарном диапазоне давлений. Оценка Кована интенсивности волны, вызывающей «сверхкритический сдвиг», сильно занижена.

3. При ненулевой температуре теоретическую прочность бездислокационного кристалла в условиях заданного напряженного состояния следует определять как напряжение, при котором происходит потеря устойчивости решетки в окрестности наиболее эффективного термодинамически равновесного комплекса точечных дефектов.

Авторы благодарны Л. В. Альтшулеру, В. А. Лихачеву и А. Н. Орлову за обсуждение особенностей механизма деформации при ударно-волновом нагружении, стимулировавшее проведение данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Cowan G. E.** Trans. Metallurg. Soc. AIME, 1965, **233**, 6, 1120.
2. **Smith C. S.** Ibid., 1958, **214**, 10, 574.
3. **Meyers M. A.** Scripta Met., 1978, **12**, 1, 21.

4. **Mogilevsky M. A.** Phys. Reports, 1983, **97**, 6, 357.
5. **Mogilevsky M. A., Teplyakova L. A.** Intern. Conf. on Metallurg Applications of Shock-Wave and High Strain-Rate Phenomena, Oregon, 1985, 419.
6. **Могилевский М. А., Мынкин И. О.** ФГВ, 1985, **21**, 3, 113.
7. **Frenkel J.** Z. Phys., 1926, **37**, 572.
8. **Kelly A.** Strong Solids.— Oxford: Claredon Press, 1966.
9. **Могилевский М. А., Мынкин И. О.** Картина развития пластической деформации на последовательных стадиях ударно-волнового нагружения. Деп. ВИНИТИ, 1985, № 4115-85.
10. **Молодец А. М., Дремин А. М.** Докл. АН СССР, 1979, **249**, 6, 1361.
11. **Мынкин И. О., Могилевский М. А.** Роль дефектов в физико-механических свойствах твердого тела. Тез. докл. конф. Ч. 1.— Барнаул, 1985.
12. **Asay J. R., Hicks D. L., Holdridge D. B.** J. Appl. Phys., 1975, **46**, 10, 4316.

Поступила в редакцию 4/IX 1987,
после доработки — 14/XII 1987

О СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЯХ В АМОРФНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ

В. И. Кирко, А. А. Кузовников
(Красноярск)

В последнее время опубликован ряд работ об изменениях в структуре аморфных металлических сплавов (АМС) после их ударно-волнового нагружения [1—13]. Для исследования структуры и свойств АМС использовались различные методики: измерения микротвердости, рентгеноструктурный, дифференциально-термический и сканирующий анализы, классический магнито-структурный анализ, растровая и просвечивающая электронная микроскопия (РЭМ и ПЭМ), а также методы исследований характеристик локальной магнитной анизотропии. На основе результатов этих исследований авторы работ делают выводы:

1) изменения в структуре АМС вследствие ударно-волнового нагружения могут происходить только за счет действия остаточной температуры [1—3];

2) обнаруженное упорядочение ближнего порядка происходит в результате уплотнения АМС, которое обусловлено выносом части свободного объема из структуры ударной волной [7, 9];

3) разупорядочение структуры АМС может происходить вследствие пластического течения при нагружении [11—13].

В настоящей работе на основе анализа известных экспериментальных данных рассматривается вопрос о возможных структурных изменениях в АМС, обусловленных ударно-волновым нагружением. Ввиду особенностей получения АМС из расплава последние обладают структурными неоднородностями различного масштаба. На атомарном уровне в АМС существует топологический и композиционный беспорядок, который обусловливает существование неоднородностей масштаба ~ 10 Å. Наиболее эффективны методы исследований, дающие информацию о локальном окружении атома (ядерный магнитный резонанс [14] и метод тонкой структуры края поглощения рентгеновских спектров (EXAFS) [15]).

Конечная скорость охлаждения при получении АМС из расплава приводит к возникновению неоднородностей диффузионного расслоения масштаба ~ 100 Å. Структура флуктуационных неоднородностей подобного типа может быть выявлена с помощью ПЭМ [16] либо малоуглового рентгеновского рассеяния [17].

На рис. 1 приведена фотография, полученная методом ПЭМ, которая демонстрирует флуктуацию плотности в АМС на основе железа. Структура характеризуется набором характерных размеров флуктуаций