

## ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ И ФОРМИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПЯТЕН В МАТЕРИАЛАХ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

УДК 539.63

С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Д. Ю. Сараев

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634048 Томск

*На основе метода молекулярной динамики исследовалось формирование тепловых пятен в материалах при высокоскоростном нагружении. Показано, что возникновение тепловых пятен связано с высвобождением упругой энергии, запасенной в области дефектов. Развитие теплового пятна сопровождается интенсивным выделением энергии и структурными перестройками в месте его расположения. Полученные результаты имеют важное значение для понимания эффектов механической активации компонентов при твердофазных химических реакциях.*

В условиях высокоэнергетического воздействия в гетерогенных материалах, в частности в материалах с дефектами структуры, могут формироваться тепловые пятна («hot spots») [1]. Их образование может оказывать значительное влияние на физико-химические процессы в материале в условиях нагружения. Тепловое пятно представляет собой ансамбль атомов, средняя кинетическая энергия которых значительно превышает среднюю кинетическую энергию по образцу. Проблема тепловых пятен весьма важна, в частности, при изучении твердофазных химических реакций. Считается, что тепловые пятна при достижении некоторого критического размера могут инициировать химические реакции в материалах.

В работе [1] механизм возникновения тепловых пятен исследовался для двумерного случая на основе молекулярно-динамического моделирования. Авторами было показано, что тепловые пятна могут возникать в зонах скопления дефектов при механическом воздействии. В настоящей работе изучалась генерация тепловых пятен в результате взаимодействия уединенных импульсов, возникающих при высокоскоростном сдвиговом нагружении, с вакансионными кластерами и микрповреждениями. Исследование проводилось на основе метода молекулярной динамики. Рассматривался трехмерный кристаллит Al, который содержит два вакансионных комплекса, состоящих из четырех вакансий каждый. Расчеты проводили с использованием уникального программного комплекса «Monster MD» [2].

Объект моделирования — трехмерный кристаллит алюминия, включающий около 9000 атомов при температуре, близкой к абсолютному нулю. Координатные оси были направлены:  $OZ$  — вдоль  $\langle 111 \rangle$ ,  $OY$  — вдоль  $\langle 2\bar{1}\bar{1} \rangle$ ,  $OX$  — вдоль  $\langle 01\bar{1} \rangle$ . В направлениях  $OY$  и  $OZ$  использованы периодические граничные условия, а на гранях, перпендикулярных  $OX$ , заданы условия  $V_z = V_x = 0$ ,  $V_y^l = \text{const}$ ,  $V_y^r = 0$ , где  $V^l$  — составляющая скорости на левом краю образца,  $V^r$  — на правом краю образца. При микроскопических расчетах обычно используется атомная система единиц [3, 4], в которой боровский радиус, постоянная Планка, масса и заряд электрона равны 1. Величина шага интегрирования уравнений движения составляла 100 а. е. времени ( $2,42 \cdot 10^{-15}$  с).

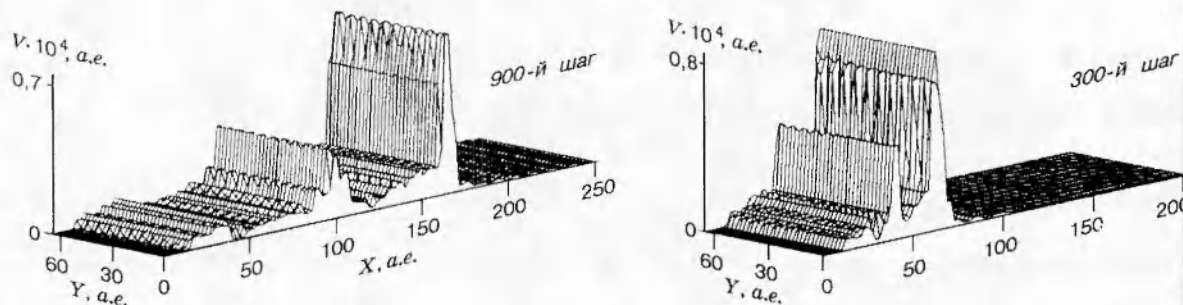


Рис. 1. Проекция на плоскость  $XY$  скоростей атомов в идеальном образце при скорости сдвига 200 м/с для 300-го и 900-го шагов по времени

Потенциал эффективного парного взаимодействия вычислялся на основе теории псевдопотенциала, как и в работе [5].

Для инициирования уединенных волн, впервые обнаруженных в [6, 7], проводилось сдвиговое нагружение образца в течение 40 временных шагов. Затем изучалось распространение и взаимодействие уединенных импульсов с дефектами структуры в исследуемом материале.

На первой стадии исследования моделировалось импульсное высокоскоростное нагружение идеального кристаллита. Результаты моделирования показаны на рис. 1. Отметим, что первые импульсы имеют только  $X$ -составляющие скорости, они представляют собой импульсы сжатия — растяжения и распространяются со скоростью, близкой к скорости звука. Эти импульсы могут быть рассмотрены как некоторый аналог упругого предвестника. Затем следуют импульсы, распространяющиеся со скоростью существенно меньшей ( $\sim 3700$  м/с). Они характеризуются значительно большей амплитудой и имеют  $X$ ,  $Y$  и  $Z$ -компоненты скоростей. Расчеты показали, что при изменении скорости сдвига скорость распространения импульсов остается постоянной, но их амплитуда при этом изменяется. Особенности распространения и взаимодействия таких импульсов исследовались в [6, 7]. Показано, что они могут формироваться в гетерогенных материалах даже при достаточно низких скоростях нагружения, в частности в результате формирования «shear bands», микрповреждений, при скачкообразном росте трещин и т. д.

На второй стадии исследования моделировалось взаимодействие вакансионного комплекса с уединенными импульсами, вызванными сдвиговыми нагружениями 200 и 50 м/с.

Проведенные исследования показали, что время возникновения тепловых пятен, продолжительность их существования на вакансионных комплексах и величина их локального разогрева непосредственно связаны с амплитудой уединенных импульсов. Чем выше амплитуда уединенного импульса, тем раньше по времени возникает разогрев области, содержащей вакансионные комплексы, тем выше локальная температура теплового пятна и меньше время его жизни. Проиллюстрируем это, сравнивая результаты моделирования для скоростей сдвигового нагружения 200 и 50 м/с. Усредненные температуры тепловых пятен составляли 600 и 250 К, разогрев области с вакансионными кластерами начинался на 350-м и 650-м временных шагах, и продолжительность жизни тепловых пятен составляла 250 и 850 временных шагов соответственно. При этом размер теплового пятна (величина области, подвергшейся разогреву) оставался неизменным. Результаты моделирования для различных моментов времени для скорости сдвига 200 м/с приведены на рис. 2.

Отметим, что природа возникновения тепловых пятен связана с высвобождением

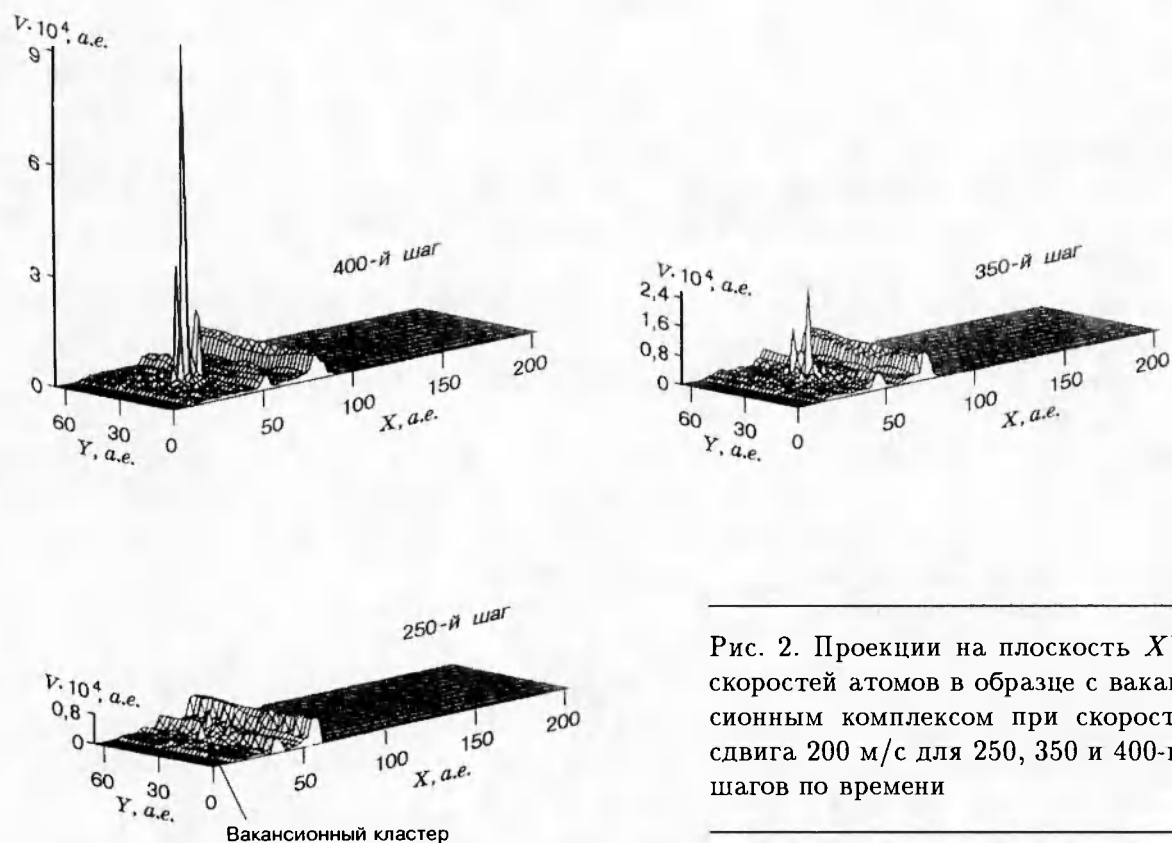


Рис. 2. Проекция на плоскость  $XY$  скоростей атомов в образце с вакансионным комплексом при скорости сдвига 200 м/с для 250, 350 и 400-го шагов по времени

упругой энергии, запасенной в области дефекта. При этом их возникновение и развитие сопровождаются существенными структурными перестройками в этой области (рис. 3), причем наибольшие смещения наблюдаются в направлении оси  $OZ$ , перпендикулярном направлению скорости сдвига и направлению движения уединенных волн. В процессе структурной перестройки скорости смещения отдельных атомов могут достигать очень больших значений (1000 м/с).

Таким образом, энергия теплового пятна определяется лавинным понижением потенциальной энергии при локальном структурном превращении, инициируемом механическим нагружением. Полученные результаты могут, в частности, быть использованы для объяснения эффектов механической активации компонентов при твердофазных химических реакциях [8–10].

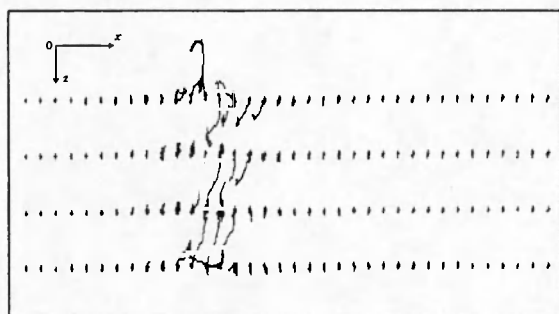


Рис. 3. Траектории атомов образца в плоскости  $XZ$  за 2000 временных шагов при скорости сдвига 50 м/с

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Tsai D. H.** Structural defects and «hot spot» formation in a crystalline solid under rapid compression. 1. Vacancy clusters and slip bands // *J. Chem. Phys.* 1991. V. 95, N 10. P. 7497–7503.
2. **Psakhie S. G., Korostelev S. Yu., Negreskul S. I., et al.** Vortex mechanism of plastic deformation of grain boundaries. Computer simulation // *Phys. Status Solidi.* 1993. V. B176. P. K41–K44.
3. **Harrison W. A.** Pseudopotentials in Theory of Metals. New York–Amsterdam, 1966.
4. **Сена Л. А.** Единицы физических величин и их размерности. М.: Наука, 1977.
5. **Теория фаз в сплавах** / В. Е. Панин, Ю. А. Хон, В. И. Наумов и др. Новосибирск: Наука, 1984.
6. **Psakhie S. G.** New mechanism of high velocity mass transfer at microlevel // *Proc. of Int. Conf. of Metallurgical and Materials Applications of Shock Wave and High Rate Phenomena. «Explomet».* El Paso, Texas, USA, 1995. P. 325–332.
7. **Псахье С. Г., Зольников К. П., Коростелев С. Ю.** О нелинейном отклике материала при высокоскоростной деформации. Атомный уровень // *Письма в ЖТФ.* 1995. Т. 21, вып. 13. С. 1–5.
8. **Ениколопян Н. С., Вольева В. В., Хзарджян А. А. и др.** Взрывные химические реакции в твердых телах // *Докл. АН СССР.* 1987. Т. 292, № 5. С. 1165–1169.
9. **Болдырев В. В.** Механохимия и механическая активация твердых веществ // *Изв. АН СССР. Сер. хим.* 1990. Вып. 10. С. 2228–2245.
10. **Болдырев В. В.** Экспериментальные методы в механохимии твердых неорганических веществ. Новосибирск: Наука, 1983.

*Поступила в редакцию 20/XI 1996 г.*