

$$t_1^* = \left(\frac{A - 2u_0 + D_{\text{пор}}}{2u_0 B \sqrt{\frac{t_n^1}{t_1} - 1}} \right)^2 t_1 + t_1.$$

Результаты приближенного решения приводятся на рис. 2, 2. Применительно к условиям проведенных опытов различие между обоими решениями не превышает 5%, что меньше отклонения рассчитанных значений от экспериментальных.

Таким образом, в работе получены экспериментальные данные о динамических давлениях в экранах, расположенных перед пористыми образцами при различном соотношении сжимаемостей экранов и материала образца. В случае одинаковых материалов образцов и экранов полученным результатам дано количественное объяснение в рамках слоистой модели пористого образца.

Поступила в редакцию 6/XII 1983,
после доработки — 19/III 1984

ЛИТЕРАТУРА

1. J. O. Johnson, J. Wackerle. 6-th Symp. H. D. P. Paris, Sept. 1967.
2. J. Thouvenin. 4-th Symp. (Intern.) on Detonation. Washington, 1965.
3. И. М. Воскобойников, М. Ф. Гоголя, Н. В. Воскобойникова и др. Докл. АН СССР, 1977, 236, 1, 75.
4. Г. И. Канель. Применение манганиновых датчиков для измерения ударного сжатия конденсированных сред. ВИНТИ, № 477-74, Деп., 1974.
5. L. M. Lee. J. Appl. Phys., 1973, 44, 9, 4017.

РОЛЬ ФЛУКТУАЦИЙ В ЗАРОЖДЕНИИ СДВИГОВ ПРИ ОДНОМЕРНОМ СЖАТИИ РЕШЕТКИ

М. А. Могилевский, И. О. Мынкин
(Новосибирск)

Нагружение кристаллических тел ударными волнами предоставляет уникальную возможность исследовать поведение твердого тела при экстремально высоких значениях напряжений и скоростей деформации. Как показано в [1], в процессе сжатия твердого тела при прохождении плоской стационарной ударной волны касательные напряжения могут достигать и даже превышать уровень теоретической прочности материала при чистом сдвиге в нормальных условиях. Давление на фронте волны, в которой касательные напряжения достигают теоретической прочности в меди, составляет около 25 ГПа. Что происходит в решетке при превышении касательными напряжениями уровня теоретической прочности (или, по терминологии механики сплошных сред, в состоянии с запредельной упругой деформацией)? Кратковременность процесса ударного нагружения не позволяет в эксперименте изучать развитие пластической деформации. Но снятие рентгенограмм в сжатом состоянии [2] и исследование структуры сохраненных монокристаллических образцов (см. [3, 4]) показывают, что даже в таких жестких условиях нагружения не происходит катастрофического смятия решетки во всем объеме: создается очень высокая плотность дефектов, но ориентация монокристаллов сохраняется.

Численное моделирование позволило наблюдать зарождение и развитие пластической деформации при сильном одномерном сжатии плоской кристаллической решетки [5—7]. Перестройка начиналась либо в месте благоприятной флуктуации в бездефектной решетке [5], либо вблизи точечного дефекта [6, 7]. Настоящая статья посвящена более подробному исследованию вопроса о зарождении сдвигов в одномерно сжатой решетке — состоянии, реализуемом на фронте ударной волны [4].

Устойчивость одномерно сжатой решетки

Простая оценка показывает, что вследствие симметрии бездефектная решетка в сильно сжатом состоянии оказывается устойчивой при малых смещениях атомов. Рассмотрим простую кубическую решетку из атомов, связанных упругими пружинами жесткости k (рис. 1). Пусть межатомное расстояние в горизонтальном направлении равно единице, а в вертикальном сжато на величину ϵ . Смещение атома в горизонтальном направлении на расстояние x при неподвижном окружении приводит к появлению силы $F = -2k \frac{1-2\epsilon}{1-\epsilon} x$, которая стремится вернуть атом в исходное симметричное положение. И только при одномерном сжатии более чем на 50% такая решетка разрушится.

Аналогичная ситуация имеет место и в гцк-решетке. В данных расчетах исследовалось поведение плоской бездефектной гцк-решетки из 500 незакрепленных атомов при постепенном одномерном сжатии на 18,6%, что при всестороннем сжатии соответствовало бы давлению 100 ГПа. Перестройки не наблюдалось, если сжатие проводилось при 70 или 300 К. В многочисленных работах других авторов по исследованию распространения сильных возмущений в двух- и трехмерной решетке также не отмечалось потери устойчивости (см., например, [8, 9]).

Схема счета

Рассмотрена модель из 162 атомов в плоскости {111} гцк-решетки, расположенных концентрическими слоями вокруг атома-инициатора перестройки. Первоначально атомы помещались в кристаллографические положения. Затем вся система сжималась вдоль заданного направления (излагаются результаты, полученные при сжатии решетки вдоль $\langle 112 \rangle$ на 18,6%), и атом-инициатор постепенно перемещался в заданном направлении α (рис. 2). Атомы, ближайšie к инициатору (от 6 в первом слое до 60 в восьми концентрических слоях), могли смещаться, остальные оставались неподвижными в узлах решетки. В расчетах использовался потенциал парного взаимодействия атомов меди [7], удовлетворяющий следующим параметрам: межатомное расстояние и модуль всестороннего сжатия при 0 К, энергия дефекта упаковки, точки на кривой холодного сжатия до 150 ГПа. Аналитическое задание потенциала в виде полинома позволяло вычислить для i -го подвижного атома энергию взаимодействия с соседями U_i , а также производные

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i}, \frac{\partial U_i}{\partial y_i}, \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i^2}, \frac{\partial^2 U_i}{\partial y_i^2}, \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i \partial y_i},$$

где x_i, y_i — координаты i -го атома. Эти величины заносились в «матрицу энергий». Атом-инициатор смещался вдоль заданного направления на некоторое расстояние (от 0,2 до 0,01 Å), в матрицу энергий вносились вызванные этим смещением изменения, после чего энергия системы минимизировалась специально разработанным комбинированным вариационным методом, позволяющим учесть различные ситуации. Производился последовательный перебор подвижных атомов в случайном порядке. Если для i -го атома матрица

$$A_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i^2} & \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i \partial y_i} \\ \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 U_i}{\partial y_i^2} \end{pmatrix}$$

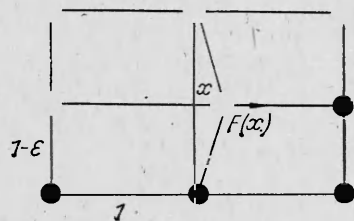


Рис. 1. Схема взаимодействия смещаемого атома с закрепленными соседями.

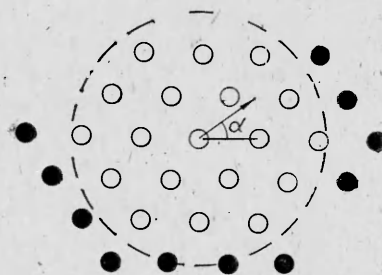


Рис. 2. Расчетная ячейка: центральный атом перемещается в направлении α , штриховой линией показана область разрешенных смещений.

положительно определена, то полином второго порядка, аппроксимирующий функцию U_i , имел минимум и атом перемещался в точку

$$x_i + \frac{\frac{\partial U_i}{\partial y_i} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i \partial y_i} - \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \frac{\partial^2 U_i}{\partial y_i^2}}{|A_i|},$$

$$y_i + \frac{\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i \partial y_i} - \frac{\partial U_i}{\partial y_i} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i^2}}{|A_i|}.$$

Далее вычислялось изменение энергии ΔU_i . При $\Delta U_i < 0$ вносились соответствующие изменения в матрицу энергий. Однако недостаточная точность квадратичной аппроксимации могла привести к $\Delta U_i \geq 0$. В этом случае, а также если A_i не являлась положительно определенной, использовался метод наискорейшего спуска [10]. Вычислялось

$$D_i = \frac{\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i}\right)^2 \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i^2} + \left(\frac{\partial U_i}{\partial y_i}\right)^2 \frac{\partial^2 U_i}{\partial y_i^2} + 2 \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \frac{\partial U_i}{\partial y_i} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i \partial y_i}}{\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial U_i}{\partial y_i}\right)^2}$$

и в случае $D_i > 0$ атом смещался в точку

$$x_i - \frac{\frac{\partial U_i}{\partial x_i}}{D_i}, \quad y_i - \frac{\frac{\partial U_i}{\partial y_i}}{D_i},$$

что соответствовало скорейшему градиентному спуску. При $\Delta U_i < 0$ переходили к расчету положения следующего атома. $D_i \leq 0$ указывало на отсутствие минимума у квадратичной аппроксимации U_i в направлении антиградиента. Тогда использовали простой градиентный метод. Первоначально выбирали $\lambda = 0,32 \text{ \AA}$, и атом смещался в точку

$$x_i - \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \frac{\lambda}{c}, \quad y_i - \frac{\partial U_i}{\partial y_i} \frac{\lambda}{c},$$

где $c = \sqrt{\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial U_i}{\partial y_i}\right)^2}$. При $\Delta U_i < 0$ расчет заканчивался, при $\Delta U_i \geq 0$ величина λ уменьшалась вдвое, и процесс повторялся до достижения $\Delta U_i < 0$.

Если после перебора всех атомов оказывалось, что все A_i положительно определены и все смещения не превосходят $0,0025 \text{ \AA}$, считалось, что минимум энергии достигнут, и проводилось следующее смещение инициатора. В противном случае выбиралась новая случайная последовательность

перебора атомов и проводилась следующая итерация. Описанный метод оказался как минимум на порядок более экономичным, чем использованный первоначально динамический метод с подавлением кинетической энергии (см. в [11] формулу (14)).

Результаты расчетов

Зависимость энергии активации от размера области смещений. Наличие вне области смещений атомов, не реагирующих на процесс релаксации, естественно, стабилизирует исходное симметричное расположение атомов. Однако при флуктуационном характере зарождения перестройки область согласованных движений должна иметь достаточно малые размеры. Поэтому в первых расчетах исследовалось влияние размеров области, где атомам разрешалось смещаться в соответствии с изменением положения атома-инициатора. Решетка была сжата в направлении $\langle 112 \rangle$ на 18,6%. Потенциальная энергия системы сначала растет с перемещением атома-инициатора из симметричного положения, но при некотором критическом расстоянии происходит ее резкий спад (рис. 3). Критическое значение энергии будем считать энергией активации перестройки E при данных условиях сжатия, размере области смещений, направлении движения инициатора. В точке перестройки обычно наблюдается резкий спад на кривой, что свидетельствует о существенном отличии соответствующих атомных конфигураций. При дальнейшем перемещении инициатора в том же направлении происходит еще небольшое уменьшение энергии системы, а затем рост, что указывает на достижение новой устойчивой конфигурации. Зависимость E от числа атомов n в зоне разрешенных смещений, пропорционального квадрату радиуса зоны, приведена на рис. 4 для направления перемещения инициатора $\alpha = 28,6^\circ$. Следует отметить два существенно отличающихся участка на графике: $E \sim 8 \div 12$ эВ в области малых размеров зоны разрешенных смещений (до 42 атомов, 6 ближайших слоев) и $E \sim 0,6 \div 0,8$ эВ в области большего размера зоны. На кривой зависимости $E(n)$ для зоны из 42 атомов имел место перегиб при $E \sim 1$ эВ, а затем при $E = 8$ эВ сброс (эти участки соответствуют разным механизмам перестройки).

Сильная зависимость энергии активации зарождения перестройки от размера рассматриваемого участка кристалла позволяет объяснить противоречие между оценками времени перехода решетки из исходного в сжатое состояние в расчетах распространения фронта в длинном узком кристалле [8, 9] и в расчетах [7] поведения широкого участка кристаллической решетки при одномерной деформации. В первой серии работ рассматривалась либо двухмерная полоса шириной до 10 атомов [8], либо стержень с поперечным размером 3×3 или 7×7 атомов [9]. Согласно полученной зависимости $E(n)$, даже при сжатии, соответствующем волне в 100 ГПа, в таких структурах невозможно зарождение сдвига. Следовательно, в таких расчетах моделируется не сильная ударная волна в кристаллическом теле, для которой пластическая деформация — важнейший признак (см. [4]), а распространение аномально сильного упругого возмущения. Не удивительно тогда и малое значение толщины фронта «ударной волны» в этих расчетах (2—5 межатомных расстояний, что соответствует времени перехода в сжатое состояние за $(1 \div 2) \cdot 10^{-13}$ с). Согласно расчетам поведения участка плоской решетки из 500 атомов при одномерном сжатии, время перехода в сжатое состояние при $p \sim 100$ ГПа оценено величиной порядка 10 пс, чему соответствует переходный слой толщиной около 200 атомов [7]. При сжатии за такое время в кристалле успевают зародиться и развиваться пластическая деформация, и характер зависимости уровня касательных напряжений от величины сжатия согласуется с видом кривой, предсказанной в [1] для стационарной ударной волны.

Зависимость энергии активации от направления смещения атома. На рис. 5 показаны результаты расчетов энергии активации перестройки

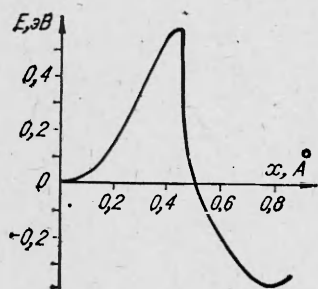


Рис. 3. Зависимость энергии системы от перемещения инициатора. В области смещений число атомов $n = 60$, $\alpha = 54^\circ$.

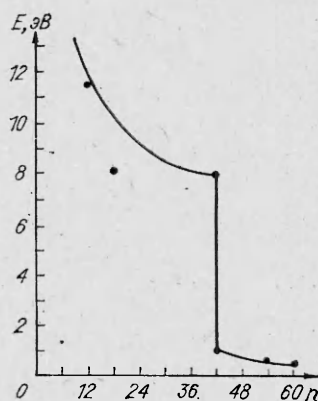


Рис. 4. Зависимость энергии активации перестройки от числа атомов в области разрешенных смещений.

решетки при максимальном из рассматривавшихся размеров области смещений — 8 слоев (или 60 атомов). Лишь вблизи 0° , т. е. при направлении смещения атома-инициатора, близком к $\langle 110 \rangle$ в решетке, сжатой вдоль $\langle 112 \rangle$, перестройка оказывается сильно затрудненной, требуется энергия активации ~ 7 эВ. В других направлениях барьер значительно ниже — $E \sim 0,6 \div 1$ эВ. При смещении под углом, близком к нулю, даже при максимальном размере области смещений перестройка проходила по обменному механизму. На рис. 5, 6 выделена область вблизи минимума 0,582 эВ. Примерно такие же значения энергии активации получены при двух других направлениях сжатия решетки: $\langle 110 \rangle$ и направления, при котором кратчайшее расстояние между атомами в сжатом состоянии оказывалось под углом 45° .

Кристаллография перестройки. Анализ расположения атомов выявил в зависимости от направления перемещения атома-инициатора протекание перестройки по двум различным механизмам: обменному и сдвиговому. При обменном механизме по мере перемещения инициатора ближайшие соседи подстраиваются к возмущению, и при критическом значении перемещения происходит потеря устойчивости со скачкообразным смещением нескольких атомов на расстояние порядка межатома, при этом один из соседей занимает узел, в котором находился атом-инициатор. На рис. 6 показана перестройка решетки по обменному механизму для области разрешенных смещений из 18 атомов и при движении инициатора (показано толстой стрелкой) под углом 25° , конечные расположения атомов — темные кружки, начальные — светлые, для некоторых из ближайших соседей показаны положения на

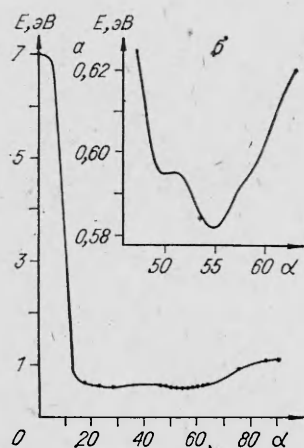


Рис. 5. Зависимость энергии активации перестройки от направления перемещения инициатора; $n = 60$.

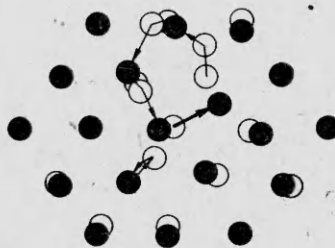


Рис. 6. Перестройка по обменному механизму при перемещении центрального атома под углом $\alpha = 27^\circ$; $n = 18$.

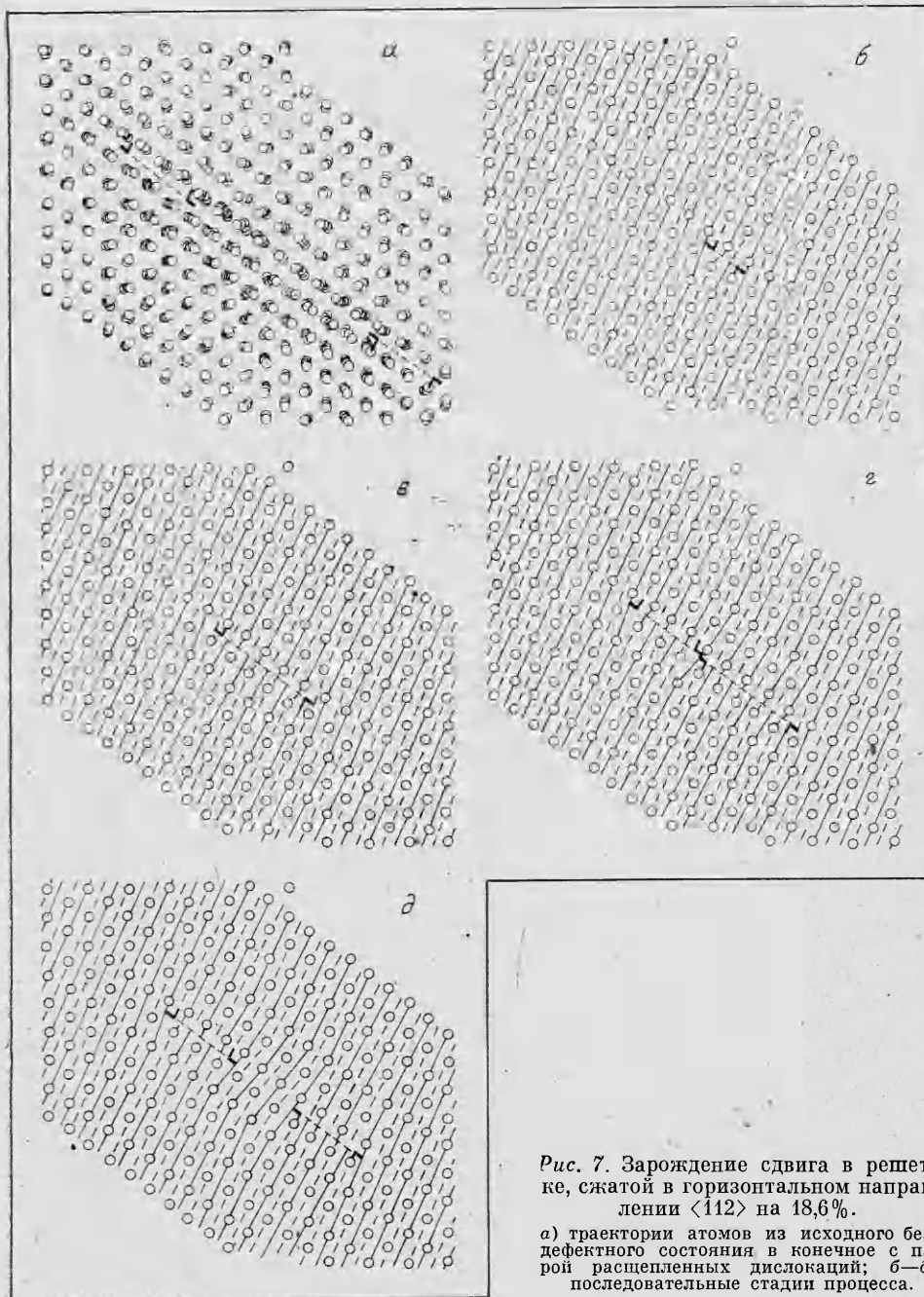


Рис. 7. Зарождение сдвига в решетке, сжатой в горизонтальном направлении $\langle 112 \rangle$ на 18,6%.
 а) траектории атомов из исходного бездефектного состояния в конечном с парой расщепленных дислокаций; б—д) последовательные стадии процесса.

шаге, предшествующем перестройке. Интересно отметить, что при анализе обменного («кольцевого») механизма диффузии Зинером [12] показано немонотонное изменение энергии активации с ростом числа атомов, вовлеченных в движение по цепочке. Зависимость имела минимум при 4 атомах, именно такое число атомов участвовало в процессе перестройки нашей решетки (см. рис. 6).

При достаточно большом размере решетки (более 6 слоев) перестройка обычно проходила по сдвиговому механизму. В результате в первоначально бездислокационной решетке возникала пара дислокаций противоположного знака — полных или частичных (рис. 7, д, е). Поскольку стадии процесса зарождения сдвига в бездислокационной решетке, по-видимому, ранее не наблюдались ни в эксперименте, ни в машинном

счете, на рис. 7 показаны общая картина зарождения дефекта с траекториями атомов и последовательные стадии развития процесса. Картина получена для плоского участка решетки из 500 атомов, одномерно сжатой на 18,6% в направлении $\langle 112 \rangle$. Расчет проводился обычным методом молекулярной динамики [7, 11]. Одномерно сжатая холодная решетка в соответствии с развиваемыми представлениями является устойчивой. Каждому атому сообщена в начале счета тепловая энергия, соответствующая 200 К. Через несколько шагов установилось равновесное распределение по скоростям. Затем на каждом шагу счета (10^{-14} с) производился «подогрев» решетки на 0,25 К. Перестройка началась только при 424 К. Сначала произошел местный изгиб плоскостей типа $\{110\}$ (на рис. 7 это чередующиеся сплошные и штриховые линии), перпендикулярных намечающейся плоскости скольжения, затем одна из них разорвалась и половинки разошлись с образованием дефекта упаковки, ограниченного частичными дислокациями (рис. 7, б). Расстояние между частичными дислокациями возрастало (рис. 7, в). На следующей стадии процесса разорвалась еще одна плоскость между частичными дислокациями и образовались две полные дислокации, расходящиеся в противоположные стороны в соответствии с направлением касательных напряжений в плоскости скольжения. Скорость движения лидирующей частичной дислокации (5–6 км/с) близка, видимо, к скорости распространения сдвиговой волны в данных условиях сильного несимметричного сжатия решетки.

Коллективный характер смещений атомов при зарождении сдвига. Существенная особенность описанного выше машинного эксперимента — согласованный изгиб нескольких плоскостей перед зарождением сдвига. Это наблюдение показывает, что зарождение перестройки может происходить не только в результате перемещения одного атома в благоприятном направлении. Анализ структуры решетки позволил заметить, что расположение атомов в вертикальных рядах напоминает фотографию звучащей струны: они с некоторым периодом смещены в поперечном направлении в противоположные стороны. Это энергетически выгодно, так как приводит к некоторой релаксации упругой энергии сильно сжатых вертикальных связей. Согласованные смещения атомов в соседних рядах играют, видимо, определяющую роль в возникновении местного изгиба плоскостей. Простейшим примером процесса, приводящего к изгибу, является смещение соседних атомов, расположенных по разные стороны плоскости скольжения, в противоположные направления. Расчет по вариационному методу для инициатора в виде такой пары атомов дал для зоны из 60 атомов $E = 0,480$ эВ, что меньше минимального значения 0,582 эВ для наиболее благоприятного направления перемещения одного атома-инициатора. По-видимому, и это значение следует рассматривать как несколько завышенное.

Влияние точечных дефектов на зарождение перестройки. Устойчивость бездефектной решетки по отношению к зарождению сдвига возрастает с уменьшением величины сжатия. В связи с этим, естественно, возникает вопрос: где зарождаются сдвиги в реальных материалах при ударных давлениях, ненамного превышающих динамический предел текучести, когда размножение исходных дислокаций уже не может обеспечить наблюдаемых скоростей деформации (см. [4], гл. 1 и 6). Наиболее вероятно, что сдвиги будут зарождаться на точечных дефектах. В [6] показано снижение величины одномерного сжатия решетки, необходимого для начала перестройки, в области вблизи межузельного атома. На рис. 8

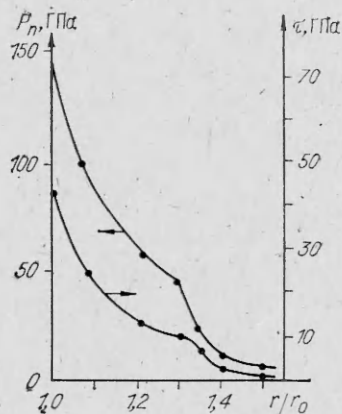


Рис. 8. Зависимость критических напряжений для начала перестройки от размера атома замещения.

приведены результаты расчета по методу молекулярной динамики зависимости нормального давления p_n в направлении одномерного сжатия и уровня касательных напряжений τ от относительного размера r/r_0 атома замещения. Расчет проводился при постепенном одномерном сжатии плоского участка решетки из 500 атомов, температура поддерживалась постоянной (300 K). Зависимости p_n и τ от r/r_0 очень сильные. Если бездефектная решетка начинала перестраиваться только при сжатии $\sim 21\%$ с давлением $p \sim 150$ ГПа, то в присутствии атомов замещения критическое давление снижается до уровня меньше 10 ГПа при $r/r_0 \geq 1,4$. Перелом на кривых при $r/r_0 \sim 1,3 \div 1,4$ связан со скачкообразным возрастанием эффективности искажения из-за увеличения числа ближайших соседей у примесного атома с 6 до 7 и 8. Еще более эффективными, чем отдельные атомы замещения, должны быть частицы выделений. В эксперименте влияние примесей на зарождение пластической деформации при ударном нагружении наблюдалось на кристаллах LiF [13].

Выводы

Показан активационный характер зарождения сдвига в бездислокационной решетке в условиях сильного одномерного сжатия, характерного для твердых тел на фронте ударной волны.

Зависимость энергии активации перестройки решетки от размера области согласованных смещений позволяет объяснить расхождение между оценками толщины фронта сильной ударной волны в кристалле в машинных расчетах различных авторов с позиций возможности развития сдвигов.

Зарождение сдвига протекает в несколько стадий: согласованные смещения соседних атомов перед образованием зародыша, изгиб нескольких плоскостей, образование двух частичных дислокаций, разделенных дефектом упаковки, разрыв дефекта упаковки с образованием двух расцепленных дислокаций (или дислокационной петли в трехмерном кристалле).

В реальных материалах наиболее вероятными местами зарождения сдвигов являются атомы замещения большого радиуса и микрочастицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. E. Cowan. Trans. Metallurg. Soc. AIME, 1965, 233, 6, 1120.
2. Л. А. Егоров, Э. В. Ниточкина, Ю. К. Орехин. Письма в ЖЭТФ, 1972, 16, 1, 8.
3. C. A. Verbraak. Zs. Metallkunde, 1964, 55, 12, 723.
4. М. А. Могилевский. Механизмы деформации при нагружении ударными волнами (обзор). ВИНТИ, 1980, № 2830—80 Деп.
5. М. А. Могилевский, В. В. Ефремов, И. О. Мынкин. ФГВ, 1977, 13, 5, 750.
6. М. А. Могилевский, И. О. Мынкин. ФГВ, 1978, 14, 5, 159.
7. М. А. Могилевский, И. О. Мынкин.— В кн.: Тр. II совещания по обработке материалов взрывом. Новосибирск, ИГ, 1982.
8. T. H. Tsai, C. W. Beckett.— In: Behavior of dense media under High Dynamic Pressure. Paris: Dunod, 1968.
9. A. Paskin, G. J. Dienes. J. Appl. Phys., 1972, 43, 4, 1, 1605.
10. Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике. М.: Наука, 1973.
11. Ю. М. Плишкин.— В кн.: Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. Л.: Наука, 1980.
12. C. Zener. J. Appl. Phys., 1951, 22, 2, 372.
13. Y. M. Gupta, G. E. Duvall, G. B. Fowles. J. Appl. Phys., 1975, 46, 2, 532.