

воначальное состояние. В дальнейшем реакция может возникнуть в других участках ВВ и снова затухнуть.

Очевидно, вибрационная нагрузка оказывает двойное влияние на разложение твердых ВВ и переход их во взрыв. С одной стороны, вибрация интенсифицирует процесс возникновения потенциальных центров химической реакции путем активизации дислокаций и подведением дополнительной тепловой энергии к ВВ. С другой стороны, периодическая нагрузка и разгрузка образца приводят к периодическому затуханию очагов возбуждения химической реакции из-за частичного понижения температуры в результате удаления нагретых газообразных продуктов из реакционной зоны. Эти конкурирующие процессы и будут определять условия перехода медленного разложения ВВ во взрыв при вибрационных воздействиях.

*Поступила в редакцию
20/IX 1977*

ЛИТЕРАТУРА

1. К. К. Андреев. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ. М., «Наука», 1966.
2. В. В. Болдырев. Методы изучения кинетики термического разложения твердых веществ. Томск, изд-е ТГУ, 1958.
3. А. Г. Мержанов. ФГВ, 1973, 9, 1, 4.
4. Д. Янг. Кинетика разложения твердых веществ. М., «Мир», 1969.
5. А. В. Раевский, Г. Б. Манелис.— В сб.: Горение и взрыв. М., «Наука», 1972.
6. М. С. Беляева, А. И. Китайгородский, Г. К. Клименко.— В сб.: Горение и взрыв. М., «Наука», 1972.
7. А. В. Раевский, Г. Б. Манелис.— В сб.: Проблемы кинетики элементарных химических реакций. М., «Наука», 1973.
8. И. А. Одинг. Теория дислокаций в металлах и ее применение. М., Изд-во АН СССР, 1959.
9. В. С. Иванова.— В сб.: Прочность металлов при циклических нагрузках. М., «Наука», 1967.
10. Н. К. Барамбойм. Механохимия полимеров. М., Ростехиздат, 1961.
11. Н. П. Логинов, С. М. Муратов, Н. К. Назаров. ФГВ, 1976, 12, 3, 410.

ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ОДНОМЕРНОЕ СЖАТИЕ РЕШЕТКИ

М. А. Могилевский, И. О. Мынкин

(Новосибирск)

В работе [1] в машинном эксперименте исследовано поведение плоской кристаллической решетки при сильном одномерном сжатии с использованием потенциала взаимодействия атомов Борна — Майера для меди. Получено, что при достаточно сильных сжатиях (больше 13,6%, что соответствует сжатию при ударном нагружении 300 кбар [2]) происходит перестройка решетки с образованием новых плоскостей. Проанализированы особенности перестройки, возможность реализации такого механизма в эксперименте.

В настоящей статье описываются результаты машинного счета, проведенного по аналогичной программе для плоской решетки (10×30 атомов) с введенной до начала сжатия парой Френкеля — междуузельным атомом и вакансией. Введение сразу двух дефектов сделано

по двум соображениям: 1) в одном расчете можно наблюдать влияние разных дефектов; 2) в принятой схеме расчета для прямоугольного участка решетки это дает большие основания для пренебрежения изменением объема и формы рассматриваемого элемента вследствие наличия дефектов.

Одномерное сжатие, как и в [1], рассматривалось в направлении $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ в плоскости $\{111\}$. Взаимодействие атомов описывалось потенциалом Борна — Майера для меди [3] $\varphi = A \exp \left[-\alpha \frac{r - r_0}{r_0} \right]$,

где $A = 0,053$ эВ, $\alpha = 13,9$, $r_0 = 2,86$ А; потенциал такого вида широко используется в работах по изучению конфигураций дефектов в решетке, по изучению радиационных эффектов. Атомам в начале счета задавалась средняя тепловая скорость согласно температуре меди за фронтом сжатия при соответствующем данному сжатию давлении [2]. Рассчитывалось поведение решетки при 25—500 кбар. Шаг по времени составлял 10^{-14} с. Через каждые 10 шагов машина выдавала положения атомов решетки. Расчет проводился на машине БЭСМ-6, время счета варианта составляло 1 ч.

После введения вакансии и междуузельного атома в идеальную решетку на расстояниях в 10 межатомных от противоположных боковых стенок решетки предоставлялась возможность «срелаксировать» возникающие вблизи от дефектов большие напряжения. Практически уже через 10 шагов по 10^{-14} с распределения атомов у дефектов были близки к равновесным, атомы в окрестности вакансии сместились в сторону дефекта, междуузельный атом входил в плотно упакованный ряд, лежащий вдоль направления $\langle 101 \rangle$, образуя расщепленную конфигурацию. Лишь после такой релаксации исследовалось поведение решетки при одномерном сжатии, для чего вертикальные координаты всех атомов уменьшались на заданную величину.

Ни в одном из расчетов с давлением до 300 кбар не было отмечено изменение ближнего порядка в области, где находилась вакансия (рис. 1). Следует подчеркнуть, что в решетке без дефектов при 300 кбар наблюдалась перестройка с образованием дополнительной вертикальной атомной плоскости [1]. Таким образом, область с вакансией вследствие меньшей локальной плотности оказывается более устойчивой при одномерном сжатии, чем хорошая решетка.

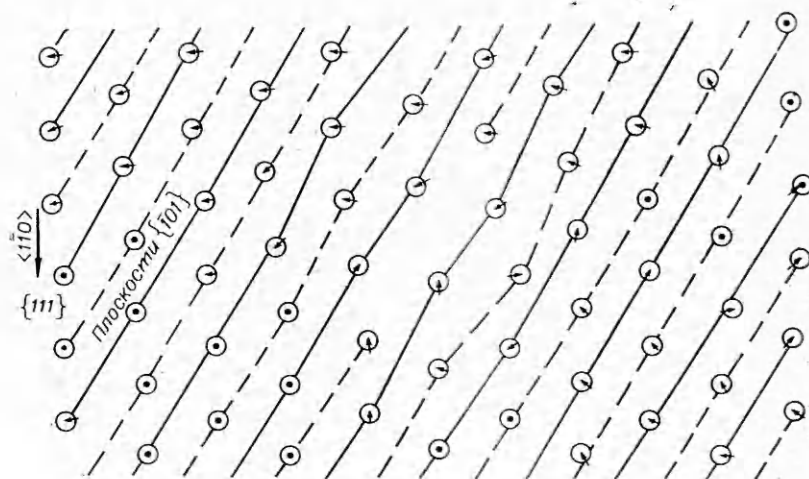


Рис. 1. Участок решетки, сжатой в вертикальном направлении на 13,6% (300 кбар), в окрестности вакансии.

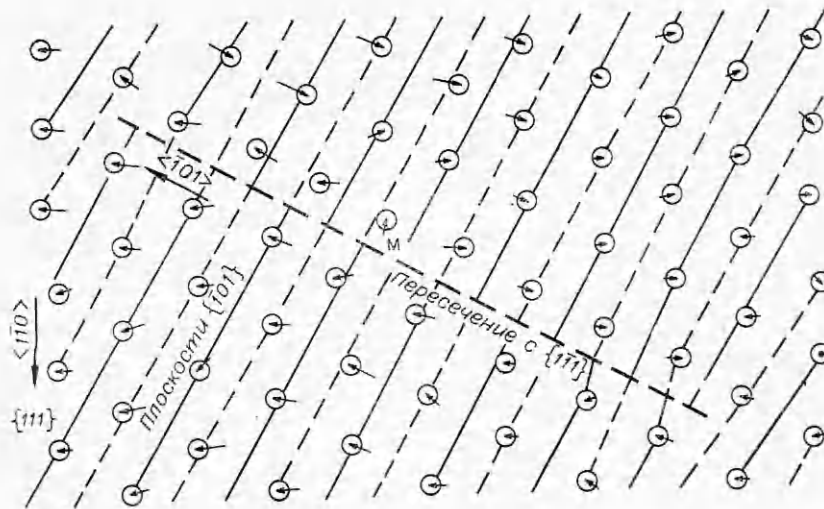


Рис. 2. Перестройка решетки, сжатой в вертикальном направлении на 6% (100 кбар), в окрестности междуузельного атома.

Интересный эффект наблюдался в области, где находился междуузельный атом. На рис. 2 (сжатие по вертикали на 6%, что соответствует ударной волне в меди интенсивностью 100 кбар [2]) междуузельный атом обозначен буквой М, окружности представляют конечные положения атомов после 100 шагов счета, стрелки — смещения атомов из начальных в конечные положения. Наложение одноосного сжатия (точнее, связанных с ним касательных напряжений) приводит к зарождению сдвига вблизи дефекта. Часть кристалла, расположенная выше того ряда, в который вошел междуузельный атом, смещается вправо вниз, атомы в нижней зоне — в противоположную сторону. По-видимому, определяющую роль в атомном механизме зарождения сдвига вблизи междуузельного атома играет то обстоятельство, что некоторые атомы из-за дефекта оказались сильно сдвинутыми со своих исходных положений в хорошей решетке в направлениях, способствующих развитию сдвига под действием внешних касательных напряжений.

В результате сдвига в кристалле возник дефект упаковки, на рис. 2 этот дефект представляет след пересечения $\{111\}$ с плоскостью сдвига $\{111\}$. В неискаженной решетке имеет место чередование плоскостей $\{101\}$. На рис. 1 и 2 пересечения этих плоскостей с плоскостью $\{111\}$ изображены чередующимися наклонными сплошными и пунктирными линиями. В области дефекта упаковки происходит нарушение стыковки плоскостей: на рис. 2 сплошные следы переходят в пунктирные (подробнее о дефектах упаковки, их связи со свойствами дислокаций см. в [4]). Перестройка такого характера происходила вблизи междуузельного атома и при сжатиях, соответствующих 50 и 300 кбар. При 25 кбар перестройки отмечено не было.

Граница дефекта упаковки — двойниковой прослойки — представляет собой двойникую дислокацию, перемещение которой приводит к увеличению области, охваченной таким сдвигом. По положению границы искаженной области в различные моменты счета по результатам, полученным в основу перестройки на рис. 2, можно получить оценку скорости перемещения двойникуюющей дислокации порядка 200 м/с. В расчете для сжатия на 13,6% (300 кбар) наблюдалась аналогичная картина перестройки решетки, но сдвиг распространялся с большей скоростью. По крайней мере, к пятидесятому шагу между частичными дислокациями было 23 атомных плоскости, отсюда получается скорость распространения

ния сдвига около 330 м/с. Вследствие включения во время развития сдвига также и времени зарождения сдвига, некоторой неопределенности границы искаженной области и возможного влияния границ рассматриваемого элемента кристалла эти цифры можно рассматривать лишь как грубую оценку снизу. В реальных материалах двойники распространяются обычно со скоростью, близкой к скорости сдвиговых волн [5].

Перестройка решетки на междуузельном атоме при сжатии, заметно меньшем, чем в бездефектной решетке, происходит за счет меньшей сжимаемости микрообъема с дефектом. Следует ожидать, что эффективными зародышами сдвигов могут быть примесные атомы внедрения и атомы замещения, вызывающие местные напряжения сжатия, а также включения, имеющие меньший коэффициент сжимаемости, чем матрица. Объем, приходящийся на растворенный атом, зависит не только от размера иона, но определяется перекрытием электронных оболочек [6]. Среди элементов, с которыми медь образует твердые растворы, можно, согласно [6], выделить ряд имеющих наибольшие эффективные атомные объемы (атомный объем меди $11,8 \text{ \AA}^3$): Ge — $15,1 \text{ \AA}^3$, Cd — $18,8 \text{ \AA}^3$, In — $21,3 \text{ \AA}^3$, Sb — $22,3 \text{ \AA}^3$. Величины эффективных атомных объемов коррелируют с изменением параметра решетки твердого раствора. Так, например, параметр решетки меди изменяется от 3,6147 до 3,7158 А при введении 10,9% атомов In [7].

Предлагаемая модель зарождения сдвигов на точечных дефектах, по-видимому, может быть одним из механизмов, обеспечивающих наблюдаемое в экспериментах затухание упругого предвестника. Градиент нормальных напряжений на упругом предвестнике, согласно общепринятой модели Тэйлора [8], пропорционален скорости пластической деформации за упругим фронтом, т. е. произведению числа подвижных дислокаций и скорости их перемещения. В работах, где исследуется упругий предвестник, обычно предполагается, что плотность подвижных дислокаций не зависит от напряжений. Чтобы расчетная модель согласовывалась с экспериментами на монокристаллах меди [9], бериллия [10], фтористого лития [11], на вольфраме [9], тантале [12], приходится либо считать, что начальная плотность подвижных дислокаций на 2—3 порядка выше плотности дислокаций, которая была в отожженном материале, либо вводить в расчетную модель большой коэффициент размножения дислокаций. Настоящая работа показывает, что увеличение плотности дислокаций на упругом предвестнике может происходить главным образом не посредством размножения имеющихся в исходном материале дислокаций (это маловероятно за наблюдаемые времена), а зарождением сдвигов на точечных дефектах, примесных атомах, выделениях.

В экспериментах [9, 10] зафиксированы времена подъема давления до динамического предела порядка 2—10 нс. Можно оценить, какая плотность центров зарождения сдвигов нужна для того, чтобы за такое время создать плотность дислокаций порядка 10^9 см^{-2} . Если в условиях эксперимента сдвиги зарождаются на N центрах в 1 см^3 за 10^{-8} с , то, распространяясь в плоскости сдвига во все стороны со скоростью 200 м/с, они обеспечат плотность дислокаций $N \cdot 2\pi \cdot 2 \cdot 10^4 \cdot 10^{-8} = 10^9 \text{ см}^{-2}$. Отсюда для плотности активных центров зарождения сдвигов получается оценка $N \sim 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Число атомов меди в 1 см^3 равно $3 \cdot 10^{23}$, т. е. концентрация активных центров оказывается порядка 10^{-11} . Содержание примесей в реальных, даже очень чистых материалах на много порядков перекрывает эту величину.

Возможность зарождения дислокаций на включениях неоднократно обсуждалась в литературе (см., например, [13], где в кристаллах LiF наблюдалось возникновение дислокаций под действием кратковременного импульса сжатия на различных неоднородностях). В ряде последних

работ по ударному сжатию кристаллов LiF [11, 14, 15] в предположении о зарождении дислокаций на неоднородностях развивается расчетная схема развития дислокационной структуры. Так, в [11] зарождением дислокаций на включениях MgF_2 объясняется влияние примесей и термообработки на затухание упругого предвестника. Представляло бы большой интерес исследование влияния малых концентраций примесей на затухание упругого предвестника и профиль ударной волны в кристаллах меди.

Замечание о критических давлениях. Значения критических сжатий (и давлений) начала перестройки бездефектной решетки и решетки с точечными дефектами следует рассматривать как оценки сверху, поскольку: 1) отталкивательный потенциал Борна — Майера является простым, но не самым точным описанием атомных взаимодействий; 2) использование в расчетах значения r_0 , несколько завышенного по сравнению с [3], приводит к более «мягкому» взаимодействию атомов, чем это обычно принимается для меди; 3) возможны ориентационные эффекты в пространственной решетке; 4) неоднородности массовой скорости при распространении ударной волны по кристаллической решетке также могут способствовать возникновению мест, благоприятных для зарождения перестройки. Проводимые в настоящее время расчеты постепенного сжатия кристаллической решетки ударной волной позволяют уточнить механизмы перестройки и значения кристаллических сжатий.

*Поступила в редакцию 20/IX 1977,
после доработки — 24/XI 1977*

ЛИТЕРАТУРА

1. М. А. Могилевский, В. В. Ефремов, И. О. Мынкин. ФГВ, 1977, 13, 5.
2. Р. Мак Куин, С. Марш.— В сб.: Динамические исследования твердых тел при высоких давлениях. М., «Мир», 1965.
3. R. A. Johnson, E. Brown. Phys. Rev., 1962, 127, 446.
4. А. Зегер. Дислокации и механические свойства кристаллов. М., ИЛ, 1960.
5. Deformation twinning. Ed. R. E. Reed-Hill, N. Y., Gordon, 1964.
6. T. B. Massalski, H. W. King. Progress in materials science. Vol. 10, N 1, N. Y., Pergamon Press, 1961.
7. М. Хансен, К. Андерко. Структура двойных сплавов. Т. II. М., Металлургиздат, 1962.
8. Дж. У. Тэйлор.— В сб.: Механика, № 8, 4 (98). М., «Мир», 1966.
9. O. E. Jones, J. D. Mote. J. Appl. Phys., 1969, 40, 4920.
10. L. E. Pope, J. N. Johnson. J. Appl. Phys., 1975, 46, 720.
11. J. M. Gupta, G. E. Duvall, G. R. Fowles. J. Appl. Phys., 1975, 46, 532.
12. P. P. Gillis, K. G. Hoge, R. J. Wasley. J. Appl. Phys., 1971, 42, 2145.
13. J. J. Gilman. J. Appl. Phys., 1959, 30, 1584.
14. J. R. Asay, D. L. Hicks, D. B. Holdridge. J. Appl. Phys., 1975, 46, 4316.
15. J. J. Dick, G. E. Duvall, J. E. Vorthman. J. Appl. Phys., 1976, 47, 3987.

ВЛИЯНИЕ ПОВЫШЕННЫХ ТЕМПЕРАТУР И ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ДЕТОНАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ВОСПРИИМЧИВОСТЬ ВВ

Б. И. Шехтер, А. С. Державец, Н. К. Семенов, В. И. Павлов

(Москва)

Условия применения термостойких взрывчатых веществ в проточно-взрывной аппаратуре определяют необходимость глубокого исследования влияния повышенных температур и давления на их детонацион-