

## ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УЕДИНЕННЫХ ИМПУЛЬСОВ, ИНИЦИИРОВАННЫХ ВЫСОКОСКОРОСТНЫМ НАГРУЖЕНИЕМ, СО СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Р. И. Кадыров, Г. Е. Руденский,  
Д. Ю. Сараев

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск

Впервые проведено моделирование возникновения нелинейных уединенных волн в системе, описываемой многочастичными потенциалами межатомного взаимодействия. Исследовано поведение свободной поверхности кристаллитов Ni и Al в условиях высокоскоростного нагружения. Результаты расчетов показали, что уединенные импульсы, инициированные высокоскоростным нагружением, увеличивают свою амплитуду примерно в 1,5 раза в области свободной поверхности Ni и практически не изменяются в области свободной поверхности Al. Природа данного эффекта связывается с различиями остов-остовного взаимодействия Ni и Al.

Изучение поведения материалов на различных структурных уровнях в условиях высокоэнергетического нагружения представляет значительный интерес при разработке новых материалов, используемых в экстремальных условиях. Компьютерное моделирование таких процессов позволило выделить ряд особенностей в поведении материалов [1–4]. В частности, под влиянием высокоэнергетических воздействий в материалах на микроуровне могут возникнуть уединенные солитоноподобные импульсы нелинейной природы [2]. Характер взаимодействия таких импульсов с дефектами структуры показал, что в материалах могут формироваться «тепловые пятна» — локальные области, температура которых значительно превосходит среднюю температуру образца [4]. В работах [2–4] достаточно подробно изучены особенности прохождения уединенных импульсов через одиночные вакансии, области с пониженной атомной плотностью, границы зерен. В то же время тип потенциала межатомного взаимодействия, используемый в этих работах, не позволял описывать свойства поверхности и рассматривать условия взаимодействия уединенных импульсов со свободной поверхностью. Поэтому в настоящей работе проведено изучение особенностей взаимодействия уединенных импульсов со свободной поверхностью материала на примере кристаллитов Ni и Al. Решение данной задачи стало возможным благодаря использованию многочастичных потенциалов, позволяющих в рамках единого форма-

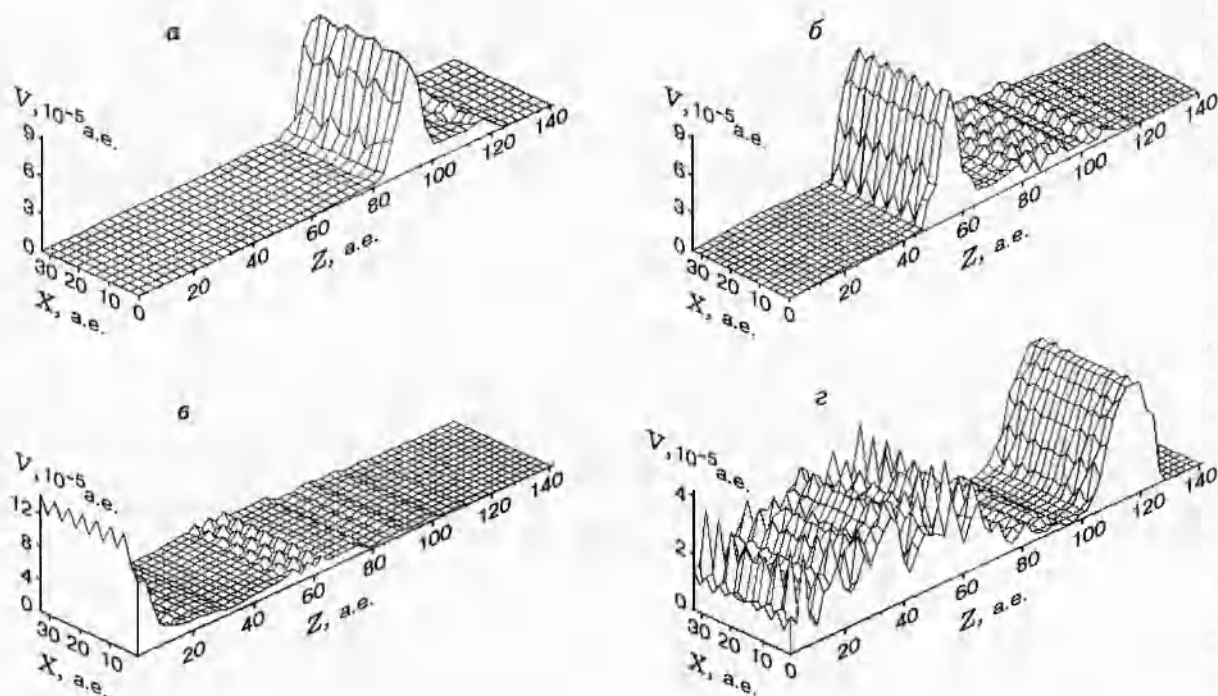
лизма и без специального переопределения параметров описывать детали межатомного взаимодействия как в объеме материала, так и в поверхностных областях [5–7].

Моделирование проводилось для трехмерных кристаллитов Ni и Al. Изучаемые образцы содержали более двух тысяч атомов. Координатные оси были направлены вдоль следующих кристаллографических направлений: ось  $OX$  — вдоль  $[1\bar{1}0]$ ,  $OY$  — вдоль  $[001]$ ,  $OZ$  — вдоль  $[110]$ . Вдоль осей  $OY$  и  $OX$  были использованы периодические условия, а вдоль оси  $OZ$  с одной стороны образца моделировалась свободная поверхность, а с другой прикладывалось механическое нагружение. Компоненты скорости нагружения имели следующие значения:  $V_x = V_y = 0$ ,  $V_z = 200$  м/с.

Использованный многочастичный потенциал взаимодействия рассчитывался в рамках модельного функционала электронной плотности (МФЭП) [5–7]. Полная энергия сплава в МФЭП записывается в виде

$$E = E_0[\bar{\rho}_v] + \sum_{ij} V(\mathbf{R}_{ij}, \bar{\rho}_v) + \sum_{ijk} V(\mathbf{R}_{ij}, \mathbf{R}_{ik}),$$

где  $\bar{\rho}_v$  — средняя плотность почти свободных электронов в системе;  $E_0$  — вклад в полную энергию, зависящий от средней плотности;  $R_{ij}$  — расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м атомами. Последнее слагаемое в формуле представляет трехчастичный вклад в энергию остов-остовного взаимодействия, а парные слагае-



Положения уединенного импульса в кристаллите Ni для шагов по времени:  
 $t$ , а.е.: 200 (а), 400 (б), 620 (в), 800 (г)

мые  $V(\mathbf{R}_{ij}, \rho_v)$  включают в себя как энергию остовных и почти свободных электронов, так и парные слагаемые их взаимодействия. Параметры потенциала определяются из известных термодинамических свойств чистых металлов (модули упругости, равновесный объем, давление на нулевой изотерме универсального уравнения состояния (UES [8]) при 20 %-м сжатии и растяжении). Функция  $\rho_v$  находится из условия минимума полной энергии и строится как суперпозиция атомных функций. Сделанные при построении полной энергии приближения сохраняют физическую корректность метода и позволяют использовать МФЭП для изучения поведения атомной подсистемы в областях высоких концентраций дефектов кристаллической структуры, пор, границ зерен, поверхности и т. д.

На первом этапе расчетов была проведена релаксация моделируемых кристаллитов Ni и Al к равновесному состоянию, что привело к изменению (поджатию) межплоскостных расстояний вблизи свободной поверхности. Полученные результаты достаточно хорошо согласуются как с другими численными расчетами [9, 10], так и с имеющимися экспериментальными данными [11, 12]. При этом, в настоя-

щей работе, как и в экспериментах [11, 12], обнаружена лишь многослойная знакопеременная релаксация приповерхностных плоскостей рассматриваемых металлов. Расчеты показали, что релаксация быстро затухает с глубиной кристаллов. Относительное изменение первого межплоскостного расстояния составило  $-2,7\%$  для кристаллита Ni и  $-4\%$  для кристаллита Al. Экспериментальный разброс данной величины составляет от  $-4,8$  до  $-9,0\%$  для Ni [11] и от  $-8,0$  до  $-10\%$  для Al [12]. Отметим, что во всех известных расчетах данный параметр также занижен по сравнению с экспериментом.

Как и в работах [2-4], где был использован парный потенциал межатомного взаимодействия, уединенные импульсы инициировались путем моделирования высокоскоростного растяжения на одной из границ кристаллита. При этом формируется уединенный импульс, который распространяется вдоль оси  $OZ$  по направлению к свободной поверхности и практически не меняет своей формы и амплитуды (рисунки а и б).

Взаимодействие уединенного импульса со свободной поверхностью в кристаллите Ni приводит к увеличению его амплитуды почти в 1,5 раза (рисунок, в), в кристаллите Al ам-

плитуда уединенного импульса практически не меняется. В результате отражения от свободной поверхности амплитуда импульсов (в обоих металлах) уменьшается (рисунок,  $z$ ). Отметим, что понижение амплитуды значительно больше, чем при прохождении уединенного импульса через области с пониженной атомной плотностью [13]. После отражения импульса от свободной поверхности первое межплоскостное расстояние уменьшается на 1,2 % в обоих металлах. Отметим, что дополнительное поджатие в Ni сохраняется значительно дольше, чем в Al.

Обнаруженные отличия в отклике кристаллитов Ni и Al обусловлены, в первую очередь, особенностями характера межатомных взаимодействий. Так, для Ni межатомное взаимодействие в значительной степени определяется короткодействующими силами отталкивания, возникающими из-за перекрытия плотностей  $3d$ -электронов между ближайшими атомами, в то время как в Al влияние перекрытия остовных электронов пренебрежимо мало [5–7].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Tsai D. H. Structural defects and "hot spot" formation in a crystalline solid under rapid compression. I. Vacancy clusters and slip bands // *J. Chem. Phys.* 1991. V. 95, N 10. P. 7497–7503.
2. 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.
3. Псахье С. Г., Сараев Д. Ю., Зольников К. П. Взаимодействие уединенных волн в материалах с атомными дефектами структуры // *Письма в ЖТФ.* 1996. Т. 22, вып. 10. С. 6–9.
4. Псахье С. Г., Зольников К. П., Сараев Д. Ю. Локальная структурная неустойчивость и формирование «тепловых пятен» в материалах при механическом нагружении // *Физика горения и взрыва.* 1997. Т. 33, № 2. С. 143–146.
5. Кузнецов В. М., Каминский П. П. Модельный функционал электронной плотности. II // *Физика металлов и металловедение.* 1987. Т. 63, № 1. С. 38–45.
6. Кузнецов В. М., Каминский П. П., Первалова В. Ф. Модельный функционал электронной плотности. II. Расчет упругих свойств чистых металлов // *Физика металлов и металловедение.* 1987. Т. 63, № 2. С. 213–218.
7. Kuznetsov V. M., Rudenskii G. E., Kadyrov R. I., Kaminskii P. P. Calculations of the Shock Hugoniot for metals and alloys // *Shock Induced Chemical Processing: Proc. of the USA–Russian Workshop.* St. Petersburg, 1996. P. 97–106.
8. Vinet P., Rose J. H., Ferrante J., Smith J. R. J. Universal equation of state // *Phys. Condens. Matter.* 1989. V. 1, N 1. P. 1941–1963.
9. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt and their alloys // *Phys. Rev. B.* 1986. V. B33, N 12. P. 6443–6453.
10. Ackland G. J., Tichy G., Vitek V., Finnis M. W. Simple  $N$ -body potentials for the noble metals and nickel // *Phil. Mag.* 1987. V. A 56, N 6. P. 735–736.
11. Adams D. L., Nielsen H. B., Andersen J. N. Oscillatory relaxation of the Cu(110) surface // *Phys. Rev. Lett.* 1982. V. 49, N 2. P. 669–672.
12. Noonan J. R., Davis H. L. Multilayer relaxation of the Al(311) surface // *Surf. Sci.* 1985. V. 29, N 1. P. 142–153.
13. Псахье С. Г., Сараев Д. Ю., Зольников К. П. Нелинейные эффекты при динамическом нагружении материала с дефектными областями // *Письма в ЖТФ.* 1998. Т. 24, вып. 10. С. 6–9.

Поступила в редакцию 16/VII 1998 г.