

РАСПРОСТРАНЕНИЕ УЕДИНЕННЫХ ВОЛН СЖАТИЯ В ГЕТЕРОГЕННЫХ МАТЕРИАЛАХ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ НАГРУЖЕНИИ

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

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск

На основе метода молекулярной динамики исследованы особенности прохождения солитонобразных волн, инициированных высокоскоростным сжатием, через области с пониженной атомной плотностью. Показано, что форма этих волн во многом определяется структурой той области материала, в которой они распространяются. Обнаружено, что уменьшение амплитуды уединенной волны определяется концентрацией дефектов. Обнаруженный эффект представляет интерес и с точки зрения развития методов контроля за накоплением микрповреждений в материалах.

Хорошо известно, что в результате высокоэнергетических воздействий материал может изменять не только свою структуру, но и физико-химические свойства [1–5]. Кроме того, высокоэнергетическое воздействие сопровождается нелинейными эффектами [6, 7]. В частности, в результате высокоскоростного механического нагружения в материале могут возникнуть уединенные (солитонобразные) волны. Их взаимодействие с вакансионными кластерами, как показано в [8, 9], может привести к генерации тепловых пятен («hot spot»), температура которых значительно превосходит осредненную температуру образца. Возникновение, разогрев и охлаждение тепловых пятен представляют значительный интерес для понимания физической природы твердофазных реакций в материалах, а также процессов механического перемешивания компонентов материала.

Цель настоящей работы — изучение особенностей прохождения уединенных импульсов, инициированных высокоскоростным сжатием, через материал, содержащий области с пониженной атомной плотностью. Все расчеты проведены для трехмерного кристаллита Al, в котором была создана область с повышенной концентрацией вакансий. Моделируемый кристаллит содержал более 12500 атомов.

Координатные оси ориентированы следующим образом: ось OZ — вдоль $\langle 111 \rangle$, OY — вдоль $\langle 2\bar{1}1 \rangle$, OX — вдоль $\langle 01\bar{1} \rangle$. В направлениях OY и OZ использованы периодические граничные условия, а на гранях, перпендикулярных OX , граничные условия задавали в виде $V_z = V_y = 0$, $V_x^l = \text{const}$; $V_x^r = 0$, где V^l — со-

ставляющая скорости на левом краю образца, а V^r — на правом.

Использовалась принятая для молекулярной динамики атомная система единиц [10], в которой боровский радиус, постоянная Планка, масса и заряд электрона равны единице. Величина шага интегрирования уравнений движения составляла 100 а.е. времени ($2,42 \cdot 10^{-15}$ с). Потенциал эффективного парного взаимодействия для атомов Al вычислен на основе теории псевдопотенциала, как и в работе [11].

Область с повышенной концентрацией точечных дефектов была создана вблизи левого края образца вдоль направления OX (рис. 1,а). Результаты расчетов для случая, когда дефектная область кристаллита содержит 25 вакансий, представлена на рис. 1. Видно, что высокоскоростное сжатие привело к возникновению уединенной, солитонобразной волны. Гребень этой волны (см. рис. 1,а) изменяется при прохождении через дефектную область (см. рис. 1,б). После прохождения области, содержащей вакансии, гребень уединенной волны восстанавливает свою первоначальную форму (см. рис. 1,в). Подобным образом ведет себя волна и в случае, когда число вакансий в дефектной области увеличивалось до 50 (рис. 2). Изменение формы солитонобразной волны, наблюдавшееся в данном численном эксперименте, показывает, что волна определяется структурой и свойствами той области, в которой распространяется. Таким образом, волны, генерированные высокоскоростным сжатием, распространяясь в материале и взаимодействуя с дефектами структуры, каждый раз меняют свою форму в соответствии с локальной структурой

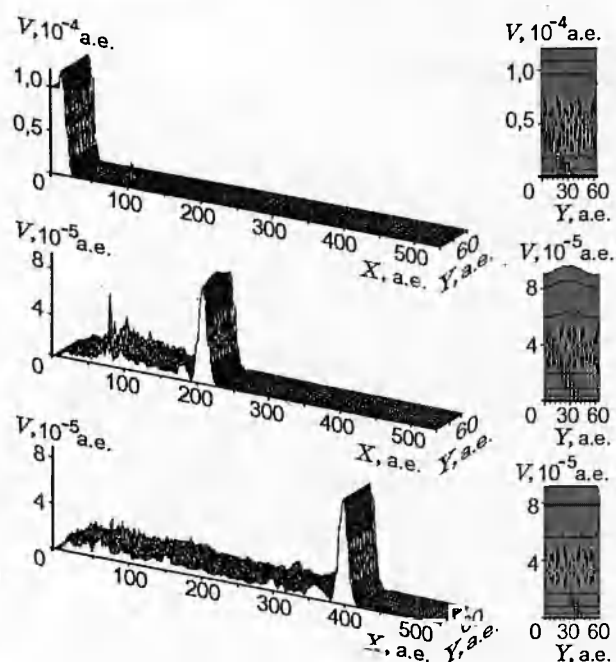


Рис. 1. Распределение скоростей атомов образца, содержащего 25 вакансий, при сжатии в плоскости XOY и вдоль направления OY :

$t = 0$ (а), $600\Delta t$ (б), $1200\Delta t$ (в)

и свойствами материала.

Настоящие расчеты показали, что амплитуда уединенных волн сжатия существенно уменьшается после взаимодействия с дефектными областями. Так, после прохождения области, содержащей 25 вакансий, амплитуда волны понизилась приблизительно на 10% по сравнению с начальным значением, а для случая с 50 вакансиями — на 20%. Отметим, что в образце с идеальной структурой амплитуда солитонобразных волн практически не изменяется. Полученные результаты означают, что наличие дефектных областей приводит к уменьшению амплитуды волны, причем чем больше концентрация дефектов, тем на большую величину уменьшается амплитуда. При прохождении же через бездефектные области эта информация сохраняется. Таким образом, распространяющаяся уединенная волна сжатия переносит интегральную информацию о гетерогенной структуре материала.

Обнаруженный эффект можно использовать для развития методов исследования процессов формирования дефектных областей и, в частности, для контроля качества покрытий.

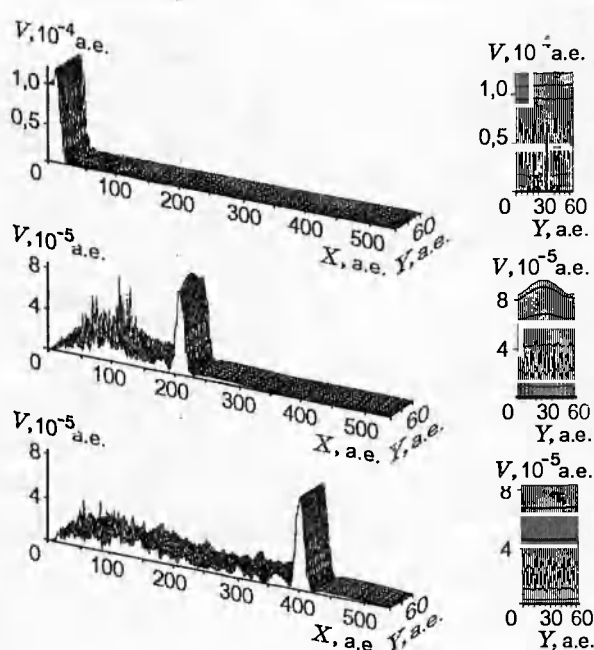


Рис. 2. Распределение скоростей атомов образца, содержащего 50 вакансий, при сжатии в плоскости XOY и вдоль направления OY :

$t = 0$ (а), $600\Delta t$ (б), $1200\Delta t$ (в)

ЛИТЕРАТУРА

1. High Pressure Shock Compression of Condensed Matter / R. A. Graham (Ed.). New York: Springer-Verlag, 1995.
2. Яковлев И. В., Сиротенко Л. Д., Ханов А. М. Сварка взрывом армированных композиционных материалов. Новосибирск: Наука, 1991.
3. Bondar M. P., Kostjukov N. A., Obodovsky Y. S. Structure and properties of dispersion hardened alloys Cu-1.9 vol.% Al_2O_3 obtained at various compaction velocities // Int. Conf. on Powder Metallurgy PM-82, Florence, Italy. 1982.
4. Костюков Н. А. Физические причины и механизмы образования пограничных зон при двумерном взрывном компактировании порошковых материалов // ПМТФ. 1991. № 6. С. 154–161.
5. Ададунов Г. А. Применение ударных волн для осуществления физико-химических превращений химических веществ: Дис... докт. физ.-мат. наук. М., 1978.
6. Bettah J., Powel J. Shock propagation in one-dimensional lattice at a nonzero initial temperature // J. Appl. Phys. 1978. V. 49, N 7. P. 3933–3941.

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. 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.
9. 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.
10. Harrison W. A. Pseudopotentials in Theory of Metals. New York; Amsterdam, 1966.
11. Теория фаз в сплавах / В. Е. Панин, Ю. А. Хон, В. И. Наумов и др. Новосибирск: Наука, 1984.

Поступила в редакцию 2/VII 1997 г.
