

01;05

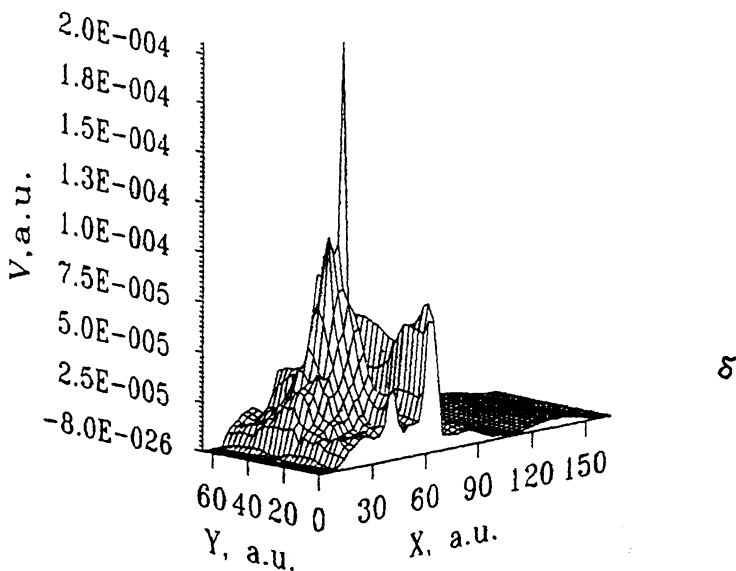
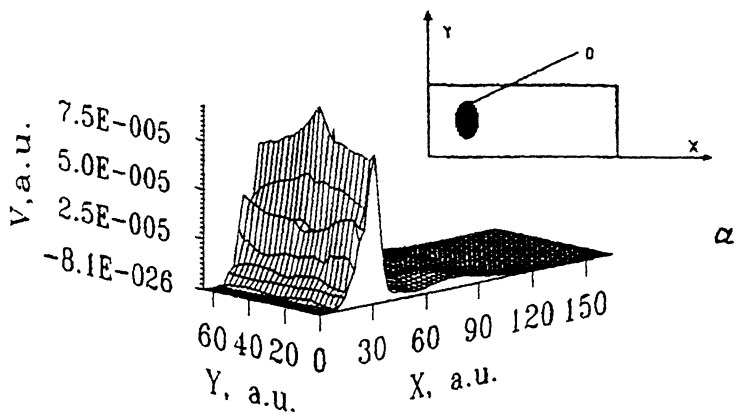
## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УЕДИНЕННЫХ ВОЛН В МАТЕРИАЛАХ С АТОМНЫМИ ДЕФЕКТАМИ СТРУКТУРЫ

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

В работе [1] впервые было обнаружено, что при высокоскоростной сдвиговой деформации в трехмерных идеальных кристаллических структурах образуются солитообразные уединенные волны, причем они возникают не только в плоскости сдвига, но и в направлении, нормальном к этой плоскости. Авторы [1] показали, что скорости распространения этих волн пропорциональны их амплитуде, а их форма практически не меняется со временем, они также могут проходить друг через друга, полностью восстанавливая свою первоначальную форму.

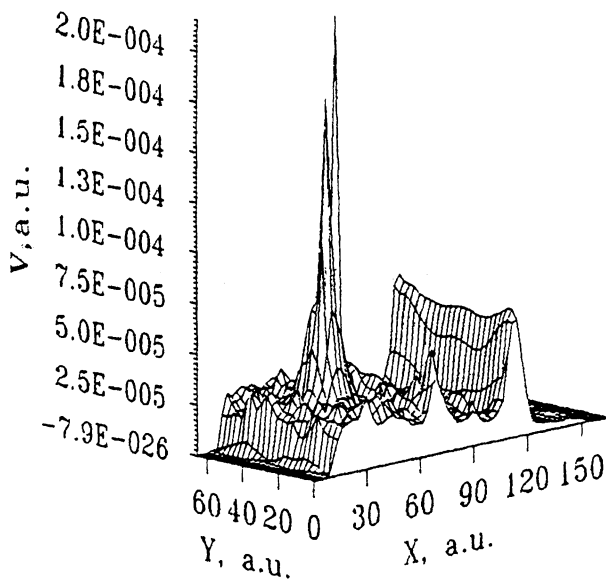
В настоящей работе изучался вопрос устойчивости полученных в [1] уединенных волн и особенности их взаимодействий с комплексами вакансий.

Расчеты проводились на основе метода молекулярной динамики с использованием уникального программного комплекса "MONSTER-MD". Объектом моделирования являлся трехмерный кристаллит алюминия, включающий более 4000 атомов, при температуре, близкой к 0 К. При моделировании солитообразных возбуждений в материале важное значение имеет выбор того или иного потенциала взаимодействия [2]. Потенциал эффективного парного взаимодействия в данной работе вычислялся на основе теории псевдопотенциала, как в [3]. При расчетах использовалась атомная система единиц, в которой борковский радиус, постоянная Планка, масса и заряд электрона равны 1. Величина шага интегрирования уравнений движения составляла 100 а. е. времени. Координатные оси направлены: ось  $OZ$  — вдоль  $\langle 111 \rangle$ , ось  $OY$  — вдоль  $\langle 2\bar{1}\bar{1} \rangle$ , ось  $OX$  — вдоль  $\langle 01\bar{1} \rangle$ . В направлениях  $OY$  и  $OZ$  использованы периодические граничные условия, а на гранях, перпендикулярных  $OX$ , задавались условия в виде:  $V_z = V_x = 0$ ,  $V_y^l = 10^{-4}$  а. е.,  $V_y^r = 0$  (где  $V^l$  — составляющая скорости на левом краю образца,  $V^r$  — составляющая скорости на правом краю образца). Исследуемый образец содержал комплекс вакансий в виде двух тетраэдров, расположенных вблизи левого края вдоль оси  $OX$ . Проекция области, содержащей дефекты, на плоскость  $XOY$  схематично показана в верхней части рисунка, а



Проекции поля скоростей атомов на плоскость  $XOY$  в моменты времени:  $a - t = 10\,000$  а. е.;  $b - t = 30\,000$  а. е.;  $c - t = 60\,000$  а. е. (В верхней части рисунка,  $a$  буквой  $D$  обозначена область, в которой расположены дефекты).

Как и в [1], для инициирования уединенной волны в течение 40 временных шагов проводилось сдвиговое нагружение, а затем изучалась эволюция инициированного данным сдвигом уединенного импульса при движении его через образец. Подобные условия нагружения реализуются при



8

продолжение рисунка.

выделении упругой энергии в результате образования микрповреждений в материалах.

На рисунке, а изображены проекции поля скоростей атомов на плоскость  $XOY$  в момент времени  $t = 10\,000$  а. е., когда уединенная волна еще не достигла области, в которой расположены дефекты структуры. В момент времени  $t = 30\,000$  а. е. уединенная волна находится в области кристаллита, в которой расположены дефекты (см. рисунок, б), а для  $t = 60\,000$  а. е. она уже прошла области расположения дефектов (см. рисунок, в).

Из рисунка видно, что форма уединенной волны существенно изменяется при взаимодействии с комплексом вакансий. При этом по мере удаления от области, содержащей дефекты, форма уединенной волны (как и в одномерном случае [4]) восстанавливается. В то же время поле скоростей, а также расположение атомов в области дефектов после прохождения волны может измениться достаточно сильно. Это связано с тем, что локальное равновесие решетки в области дефектов является неустойчивым. Поэтому даже небольшая по амплитуде уединенная волна может существенно изменить структуру в данной области кристаллита, привести к разогреву данных областей и даже появлению "hot spots" ("тепловых пятен"). Проведенные оценки показали, что область, содержащая комплексы вакансий, после прохождения уединенной волны разогревается до тем-

пературы  $\approx 200$  К. В то же время в области образца, где в данный момент находится уединенный импульс, температура не превышает 25 К. Вопрос о генерации "hot spots" при ударно-волновом сжатии в материалах, содержащих вакансионные кластеры, исследовался в работах [5,6]. При этом было отмечено, что вакансионные кластеры схлапываются в дислокационные структуры. Более подробное изучение механизмов схлапывания вакансионных кластеров и образование нанодислокационных диполей при таком нагружении было проведено в [7] для объемно-центрированной решетки.

Настоящие расчеты показали, что генерация "hot spots" может происходить не только при ударно-волновом воздействии, но и при обычном статическом нагружении, которое может привести к образованию микроповреждений и иницированию солитоноподобных импульсов. Следует отметить, что уединенные волны являются весьма устойчивыми возбуждениями не только в материалах с идеальной структурой, но и в материалах, содержащих комплексы вакансий. Обнаруженные солитонобразные возбуждения нелинейным образом взаимодействуют с дефектами решетки, формируя локально разогретые микрообласти. Данные волны характеризуются также очень низким декрементом затухания, а дальнейшее изучение их взаимодействия с дефектами структуры представляет несомненный теоретический и практический интерес, в частности при анализе процессов механической активации компонентов при твердофазных химических реакциях [8].

#### Список литературы

- [1] Псазье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1-5.
- [2] Neuper A., Gaididei Yu., Flytzanis N. // Phys. Lett. (A). 1994. V. 190. P. 165-171.
- [3] Псазье С.Г., Панин В.Е. // ФММ. 1980. С. 620-624.
- [4] Коростелев С.Ю., Псазье С.Г., Панин В.Е. // Деп. в ВИНТИ 15.05.1985. № 6080-85. М., 1985.
- [5] Tsai D. // Chemistry and Physics of Molecular Processes in Energetic Materials. V. 307. NATO Advanced Study Institute. Physics / Ed. by S. Bulusu (Kluwer Academic, Norwell, MA, 1990). 195 p.
- [6] Tsai D. // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. P. 7497-7506.
- [7] Bando F., Tsai D., Armstrong R. // Phys. Rev. (B). V. 47. N 18. P. 11 681-11 687.
- [8] Григорьева Т.Ф., Иванов Е.Ю., Болдырев В.В. // Изв. СО АН СССР. Сер. хим. наук. 1989. В. 5. С. 91-96.

Поступило в Редакцию  
20 марта 1996 г.