

01;05

Нелинейные эффекты при динамическом нагружении материала с дефектными областями

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

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 3 июля 1997 г.

Проанализированы особенности взаимодействия уединенных импульсов (солитонобразных волн), возникающих при высокоскоростном нагружении, с дефектами структуры в кристаллите Al. Расчеты проводились на основе метода молекулярной динамики. Показано, что при сдвиговом нагружении и при сжатии материала формируются различные типы уединенных импульсов, которые по-разному взаимодействуют с областями, содержащими дефекты структуры. Волны, образующиеся при сжатии, обладают более высокой скоростью распространения в материале, и их форма достаточно быстро восстанавливается после прохождения дефектных областей. Изученные явления представляют интерес для развития методов неразрушающего контроля.

Одним из наиболее важных и интересных проявлений нелинейных эффектов в материалах является формирование уединенных волн при высокоскоростном нагружении [1–5]. В работах [4–6] показано, что при взаимодействии уединенных волн с такими дефектами материала, как вакансионные кластеры, возможно формирование "hot spots" (тепловых пятен), которые играют важную роль в инициировании твердофазных реакций. При этом ряд характеристик тепловых пятен, таких как продолжительность их существования, максимальная температура их разогрева и другие связаны с величиной амплитуды уединенного импульса [5]. Поведение самих же уединенных импульсов во многом подобно поведению солитонов в одномерных цепочках [1,2,7].

В настоящей работе исследовались особенности прохождения уединенных волн через области с пониженной атомной плотностью. Кроме того, изучались отличия генерации и распространения уединенных волн, инициированных высокоскоростным сдвигом и сжатием.

Исследования проводились на основе метода молекулярной динамики с использованием уникального программного комплекса "Monster-MD" [8].

Моделировался трехмерный кристаллит алюминия, включающий около 12 500 атомов, при температуре, близкой к 0 К. Координатные оси были ориентированы: ось OZ — вдоль $\langle 111 \rangle$, ось OY — вдоль $\langle \bar{2}\bar{1}\bar{1} \rangle$, ось OX — вдоль $\langle 01\bar{1} \rangle$. В направлениях OY и OZ использовались периодические граничные условия, а на гранях, перпендикулярных OX , задавались граничные условия в виде:

1) для сжатия $V_z = V_y = 0$; $V_x^l = \text{const}$; $V_x^r = 0$, где V^l — составляющая скорости на левом краю образца; V^r — составляющая скорости на правом краю образца;

2) для сдвигового нагружения $V_z = V_x = 0$; $V_y^l = \text{const}$; $V_y^r = 0$.

Область с повышенной концентрацией точечных дефектов была создана вблизи левого края образца вдоль направления OX , а затем образец релаксировался.

Отметим, что при микроскопических расчетах обычно используется атомная система единиц [9], в которой Боровский радиус, постоянная Планка, масса и заряд электрона равны единице. Величина шага интегрирования уравнений движения составляла 100 атомных единиц времени, что соответствует $2.42 \cdot 10^{-15}$ с. Потенциал эффективного парного взаимодействия вычислялся на основе теории псевдопотенциала, как и в работе [10].

Проводился анализ распределения величин скоростей атомов и изменения формы уединенной волны в различные моменты времени. Так, на рис. 1 показаны распределения величин скоростей атомов кристаллита в плоскости XOY и вдоль направления OY для уединенной волны, инициированной сжатием. Из сравнения рис. 1, *a* и *b* видно, что гребень волны существенно изменяет свою форму в области со структурными дефектами. Отметим, что форма гребня достаточно быстро восстанавливает свой первоначальный вид, что видно из рис. 1, *c*.

Иная картина наблюдается при распространении уединенных волн, инициированных высокоскоростным сдвигом (рис. 2). В этом случае форма гребня уединенной волны (рис. 2, *a*) также существенно изменялась при прохождении области с точечными дефектами (рис. 2, *b*), но первоначальная форма гребня волны уже не восстанавливалась и ее изменение носило устойчивый характер (рис. 2, *c*).

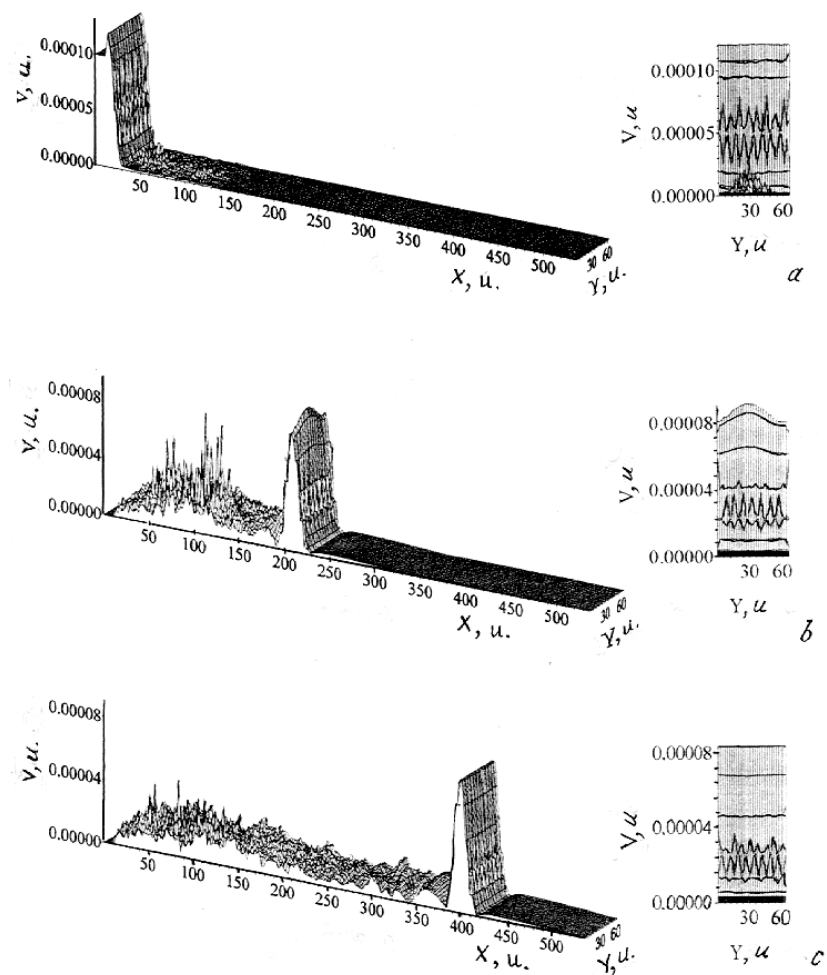


Рис. 1. Распределение скоростей атомов образца при сжатии в плоскости XOY и вдоль направления OY : $a - t = 0$; $b - t = 300 \Delta t$, $c - t = 1200 \Delta t$.

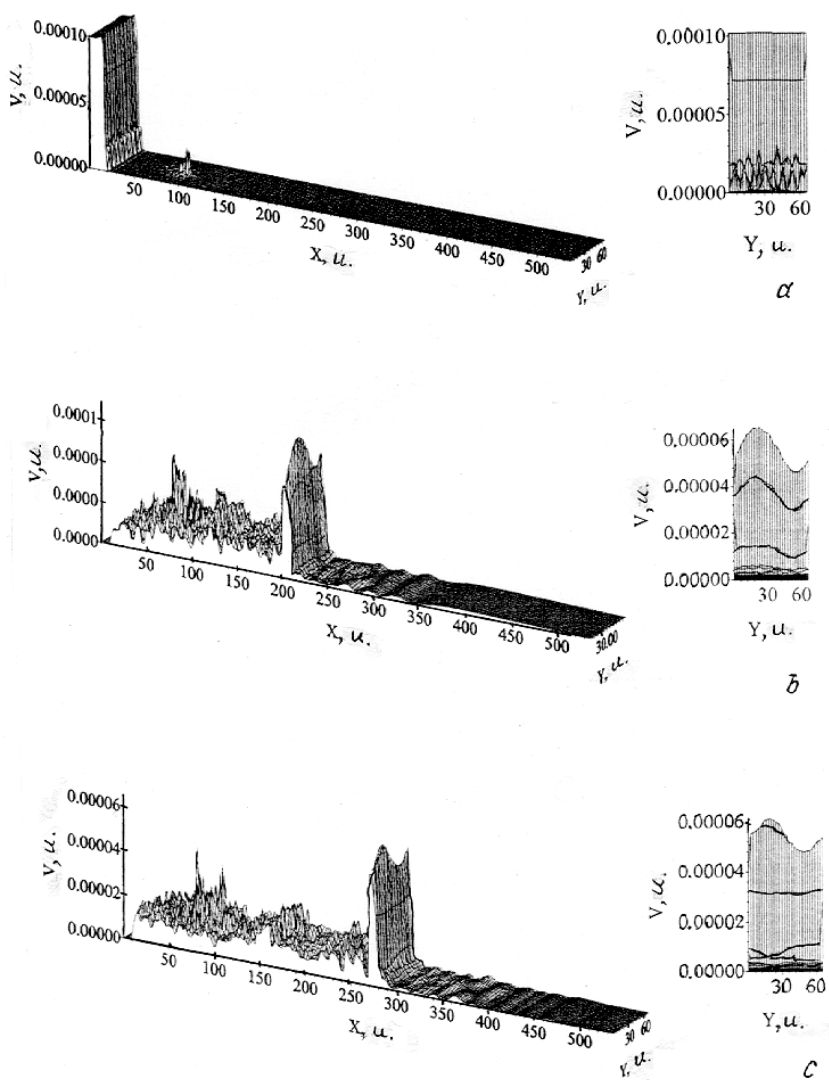


Рис. 2. Распределение скоростей атомов образца при сдвиговом нагружении в плоскости XOY и вдоль направления OY : $a - t = 0$; $b - t = 1100 \Delta t$, $c - t = 1500 \Delta t$.

Более детальный анализ результатов расчетов показал, что различные типы механического нагружения образца (сдвиг, сжатие) генерируют уединенные волны различного типа. Так, форма уединенных волн, образующихся при высокоскоростном сжатии, определяется структурой той области образца, в которой она распространяется. Было отмечено, что волна в области бездефектного кристалла восстанавливает свой первоначальный вид вскоре после взаимодействия со структурными дефектами. Расчеты показали, что уединенная волна, инициированная высокоскоростным сдвигом, отличается от волн "сжатия" не только тем, что в ее амплитуде присутствуют сдвиговые компоненты скорости, но и тем, что она обладает своеобразным "эффектом памяти". Так, если в материале содержатся области, насыщенные различного рода дефектами, то форма гребня этой уединенной волны будет испытывать постоянные изменения. Таким образом, уединенная волна, инициированная сдвигом, может переносить информацию о наличии в материале областей, содержащих дефекты структуры. Этот эффект может представлять определенный интерес для развития методов неразрушающего контроля и тестирования материалов на содержание в них областей, насыщенных дефектами структуры, а также для контроля качества покрытий.

Список литературы

- [1] *Betteh J., Powel J.* // Appl. Phys. 1978. V. 49. N 7. P. 3933–3941.
- [2] *Straub G.K., Holian B.L., Petscheck R.G.* // Phys. Rev. 1979. V. B19. N 8. P. 4049–4054.
- [3] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1–5.
- [4] *Псахье С.Г., Сараев Д.Ю., Зольников К.П.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 10. С. 6–9.
- [5] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю.* // ФГВ. 1997. Т. 33. № 2. С. 143–146.
- [6] *Tsai D.H.* // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. N 10. P. 7497–7503.
- [7] *Коростелев С.Ю., Псахье С.Г., Панин В.Е.* // Деп. в ВИНТИ. 15.05.1985. N 6080–85. М., 1985.
- [8] *Psakhie S.G., Korostelev S.Yu., Negreskul S.I., Zolnikov K.P., Wang Z., Li S.* // Phys. Stat. Sol. (B). 1993. V. 176. k41–k44.
- [9] *Harrison W.A.* // Pseudopotential in the Theory of Metals. New York/Amsterdam, 1966.
- [10] *Псахье С.Г., Панин В.Е.* // ФММ. 1980. Т. 50. С. 620–624.