

## ЛИТЕРАТУРА

1. А. Н. Дремин, С. Д. Савров и др. Детонационные волны в конденсированных средах. М., «Наука», 1970.
2. Е. Н. Александров, В. А. Веретенников и др. ФГВ, 1967, 3, 471.
3. К. К. Шведов, А. Н. Дремин. Тез. докл. на IV Всесоюзном симпозиуме по горению и взрыву. Черногоровка, 1974.
4. А. Н. Дремин, О. К. Розанов. Изв. АН СССР, серия хим., 1964, 8, 1513.
5. А. Н. Дремин, В. С. Трофимов. ФГВ, 1969, 5, 3, 304.

## ПОВЕДЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ПРИ СИЛЬНОМ ОДНОМЕРНОМ СЖАТИИ

*М. А. Могилевский, В. В. Ефремов, И. О. Мынкин*

В работах [1, 2] рассмотрено распространение ударной волны в линейной цепочке атомов и плоской решетке из 10 рядов атомов. Расчеты дают характерное нестационарное распределение энергий атомов в зоне сжатия: около 1/3 области от границы с невозмущенным материалом находилось в сильно возбужденном состоянии. Существенным недостатком расчетов было отсутствие механизмов релаксации касательных напряжений.

### Постановка задачи

В настоящей работе исследовалось поведение плоской кристаллической решетки при сильном одномерном сжатии, что характерно для поведения вещества при нагружении плоской ударной волной. В качестве модельного материала была выбрана решетка меди. Взаимодействие атомов описывалось потенциалом Борна — Майера

$$\varphi = A \exp \cdot [-\alpha(r-r_0)/r_0].$$

При значениях параметров  $A=0,053$  эВ,  $\alpha=13,9$ ,  $r_0=2,866$  Å [3, 4] потенциал хорошо описывает упругие свойства меди и энергетические характеристики точечных дефектов.

Вследствие анизотропии можно ожидать, что поведение решетки при сильном одномерном сжатии будет зависеть от ориентации. Приведенные в статье результаты получены для сжатия плоскости {111} решетки меди в направлении  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ . Кристаллография гранецентрированной кубической решетки такова, что соседние вертикальные ряды смещены на половину межатомного расстояния (рис. 1).

Расчет проводился в основном для участка плоскости из 15 вертикальных и 8 горизонтальных рядов атомов. Каждому атому, находившемуся в узле решетки, в начальный момент сообщалась тепловая скорость в произвольном направлении (набор случайных чисел). Величина тепловой скорости определялась из соотношения  $mv^2/2=kT$ , компонента скорости, перпендикулярная плоскости, не учитывалась.

Поскольку участок плоскости должен представлять часть большого кристалла, краевые условия выбраны следующим образом. Атомы на границах могут смещаться только вдоль своих границ, угловые атомы фиксированы. Взаимодействие с кристаллом вне выбранного объема учитывалось посредством зеркального отображения через соответствующие границы двух приграничных слоев.

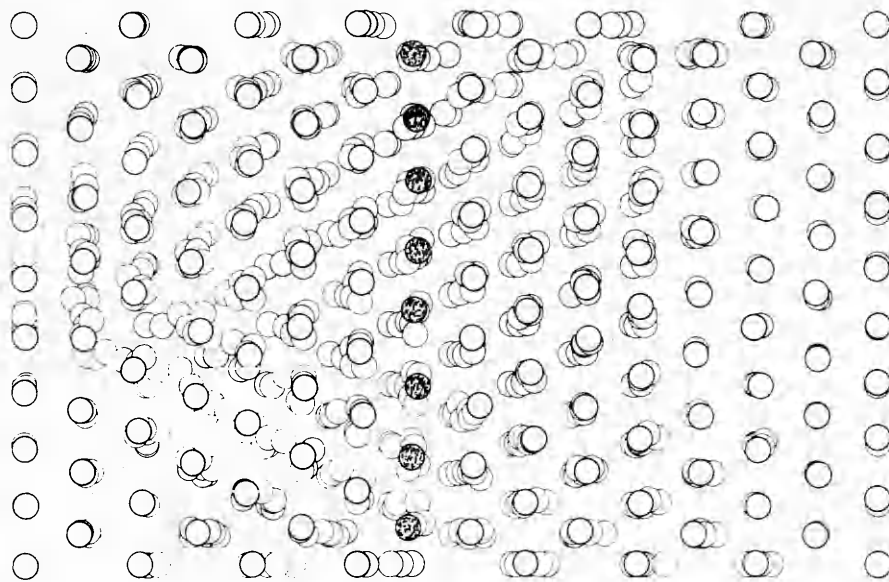


Рис. 1. Перестройка решетки посредством зарождения и последующего роста новой плоскости.

Численное решение уравнений движения атомов решетки

$$m \frac{d^2 \bar{r}_{ln}}{dt^2} = - \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq n}} \frac{\partial \varphi(\bar{r}_{ij} - \bar{r}_{ln})}{\partial \bar{r}}$$

$\bar{r}_{ln}$  указывает положение атома, первоначально находившегося в  $l$ -м горизонтальном и  $n$ -м вертикальном ряду) выполнялось по явной схеме. Шаг по времени  $10^{-14}$  выбирался так, чтобы смещения атомов при заданной средней скорости были порядка 0,05 межатомного расстояния. Взаимодействие учитывалось только с атомами, находящимися на расстоянии до  $2,2 \bar{r}_0$ . В работе [4], где вычислялись энергии перемещения точечных дефектов и их комплексов, показана малая чувствительность результатов к учитываемому расстоянию взаимодействия. На каждом шаге контролировалось выполнение закона сохранения полной энергии. Расчет проводился на вычислительной машине БЭСМ-6.

### Результаты расчета

На рис. 1 показана перестройка решетки меди, подвергнутой одномерному сжатию по вертикальному направлению на 16,4%. Исходное состояние моделирует сжатие меди в плоской ударной волне с нормальным давлением 40 ГПа (400 кбар) [5]. При таком нагружении медь нагревается от комнатной температуры до 582 К, соответствующая средняя тепловая энергия придавалась в исходном состоянии каждому атому. На рис. 2 приведена схема перестройки, полученная в другом эксперименте с давлением 50 ГПа (500 кбар), сжатием на 18,6%, исходной температурой 719 К. Конечные положения атомов на схемах изображены полными окружностями, закрывающими предшествующие положения.

Вследствие резкого возрастания потенциальной энергии взаимодействия атомов с уменьшением расстояния можно ожидать, что после некоторого сжатия решетка будет стремиться к перестройке посредством

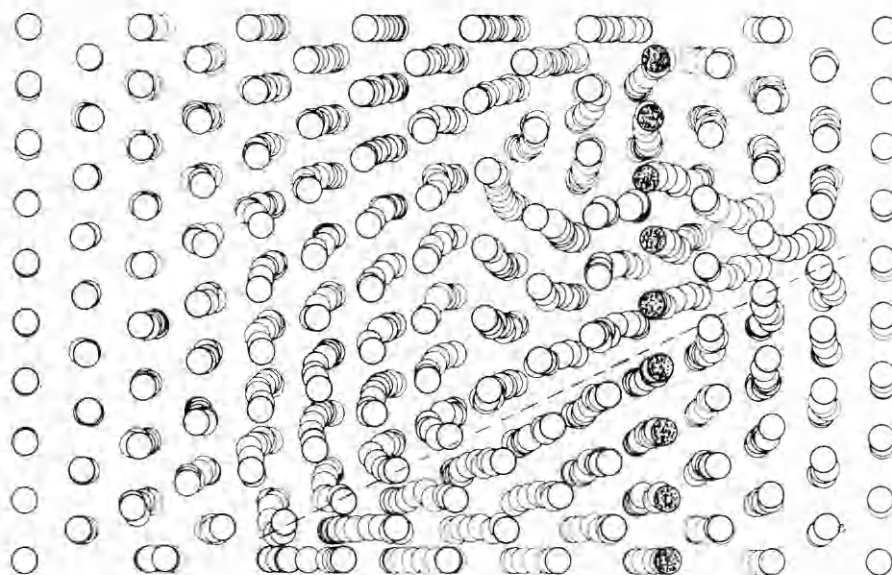


Рис. 2. Перестройка решетки после кристаллографического сдвига.

«растворения» участков горизонтальных плоскостей и перевода материала в новые вертикальные плоскости, поскольку при этом выравнивается среднее межатомное расстояние. Как показывают результаты расчета, такая перестройка имеет место, начиная со сжатий, соответствующих ударному нагружению порядка 30 ГПа. На рис. 1 и 2 атомы, образовавшие новые вертикальные плоскости, зачернены.

Можно отметить следующие характерные черты процесса перестройки решетки.

1. Наблюдались две разновидности механизма перестройки: а) возникновение и последующий рост зародыша новой вертикальной плоскости (см. рис. 1), б) перестройка решетки начинается с зарождения кристаллографического сдвига по плоскости, отмеченной на рис. 2 штриховой прямой, и лишь затем переходит к развитию новой вертикальной плоскости. Вторая разновидность перестройки происходила значительно реже перестройки первого типа. Видимо, это связано с тем, что для нее необходимо специфическое распределение начальных скоростей группы соседних атомов. Протекание одновременного сдвига по кристаллографической плоскости скольжения есть не что иное, как реализация механизма теоретической прочности. По оценке [7], в меди касательные напряжения могут достичь теоретической прочности при нагружении плоской ударной волной с нормальным давлением около 26 ГПа. Но даже и при таких сильных сжатиях, когда напряжения достигают теоретической прочности, происходит лишь релаксация напряжений посредством создания дефектов, но ближний порядок в решетке сохраняется. Похоже, что дефекты упаковки в рассматриваемых условиях могут возникать легче, чем полные дислокации.

2. Характерно, что перестройка решетки происходит не простым последовательным перемещением атомов по вакантным узлам или по междоузельным положениям. Материал к зародышу новой плоскости переносится посредством механизма типа краудинного [6], т. е. распротранения вдоль плотно упакованных направлений атомов, «размазанных» на несколько межатомных расстояний.

3. Образующиеся в результате перестройки решетки новые вертикальные атомные плоскости нарушают порядок чередования плоскостей,

свойственный идеальной решетке. В трехмерной решетке работа предлагаемого механизма должна приводить к образованию в плотно упакованных плоскостях, близких к вертикальным, дефектов упаковки междоузельного типа [6], т. е. участков новых плоскостей, а в плоскостях, близких к горизонтальным, — дефектов упаковки вакансионного типа на растворенных участках плоскостей. Прямым подтверждением обсуждаемого механизма деформации было бы наблюдение дефектов упаковки после ударного нагружения в плоскостях, параллельных или перпендикулярных фронту ударной волны, где вследствие малости касательных напряжений дефекты упаковки не могут возникнуть сдвиговым механизмом.

В литературе имеются свидетельства образования дефектов упаковки или тонких двойников при ударном нагружении (см., например, [8]), но требуется внимательный анализ ориентации этих дефектов для выяснения механизма их образования.

4. Наибольший интерес в рассматриваемой модели с точки зрения физики ударных волн представляет время релаксации напряжений. На рис. 3 показан график изменения разности давлений со стороны частиц внутреннего объема на вертикальную  $p_t$  и горизонтальную  $p_n$  границы со временем — сплошная кривая. Расчет сделан для условий сжатия при давлении 50 ГПа, релаксация решетки после 60 шагов по  $10^{-14}$  с показана на рис. 2. Начальное возрастание разницы давлений и кинетической энергии связано, по-видимому, с переходом системы частиц в более равновесное состояние, соответствующее максвелловскому распределению по скоростям. Как и следовало ожидать, релаксация девиатора напряжений приводит к уменьшению потенциальной энергии взаимодействия частиц системы, а следовательно, к увеличению их кинетической энергии  $E$ . Некоторое увеличение разницы напряжений (и соответствующее уменьшение кинетической энергии) отражают перераспределение напряжений между участком, где прошла перестройка, и остальной частью решетки. Время перестройки решетки при 50 ГПа оказалось около 30 шагов, т. е.  $\sim 3 \cdot 10^{-13}$  с. Полученному времени релаксации соответствует скорость пластической деформации  $10^{12}$  1/с, что много больше скоростей деформации, получаемых при дислокационном скольжении (см., например, [9]).

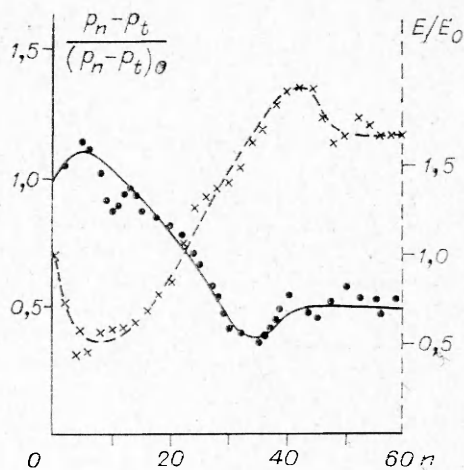


Рис. 3. Релаксация касательных напряжений при начальном сжатии в вертикальном направлении на 18,6% (схема перестройки рис. 2).

— — — изменение кинетической энергии.

### Вариации модели

Поскольку результаты, полученные с помощью вычислительных машин, естественно, во многом являются следствием выбранной модели, были проведены некоторые дополнительные машинные эксперименты с вариациями отдельных сторон программы. Увеличение времени счета до 200 шагов не приводило к новым эффектам. Отсутствие заметных отличий в процессе релаксации было отмечено также и при проведении расчета в случае сжатия 50 ГПа не при 719 К, а при комнатной темпе-

ратуре. Интересный эффект был отмечен при изменении числа вертикальных рядов. Когда расчет проводился при 50 ГПа для решетки из 30 вертикальных рядов вместо 15, имело место независимое зарождение и последующий рост двух зародышей новых плоскостей почти в самом начале счета, в конце появился и начал медленно расти еще один зародыш. При проведении расчета для того же начального сжатия, но при 7 вертикальных плоскостях, релаксации не было. По-видимому, именно с недостаточно большим числом сжимаемых рядов атомов (10) связано упругое поведение решетки в работе [2]. В их счете также наблюдались срывы отдельных атомов со своих узлов<sup>1</sup>, но образование новой плоскости было энергетически не выгодно.

В целях сравнения с экспериментом представляют интерес влияние предварительно существовавших дефектов решетки на изменение критического давления одномерного сжатия, при котором начинается перестройка решетки и проведение расчета на трехмерной решетке.

### Возможность реализации предложенного механизма

Расчет показывает, что если в процессе нагружения ударной волной кристаллическое тело испытывает достаточно сильное одномерное сжатие, может произойти релаксация напряжений посредством коллективных атомных перемещений. Однако в процессе сжатия могут начать работать другие, сдвиговые механизмы релаксации напряжений. Поэтому наиболее вероятно, что рассмотренный механизм может конкурировать со сдвиговыми механизмами в следующих случаях: 1) одноволновая конфигурация с достаточно высоким нормальным давлением на фронте, 2) деформация вблизи поверхности соударения пластин, где деформация скольжения малоэффективна из-за малого количества имеющихся дислокаций и высокой скорости деформации, 3) деформация материалов с малоподвижными дислокациями (по сравнению с обычными металлами), т. е. кристаллов с ковалентной и ионной связью, 4) в случае нецентрального характера взаимодействия частиц следует ожидать, что механизм, аналогичный рассмотренному, мог бы наблюдаться при бездиффузионных фазовых переходах.

Из экспериментов, в которых, возможно, имел место механизм релаксации рассмотренного типа, особо стоит отметить оптические исследования конденсированных диэлектриков (ионные кристаллы, стекло) при ударном нагружении [10]. По отражению света от участка вещества, где возникает скачок плотности, было оценено время процесса перехода в  $10^{-11} \div 10^{-12}$  с.

*Институт гидродинамики  
СО АН СССР*

*Поступила в редакцию  
11/XI 1976*

### ЛИТЕРАТУРА

1. D. H. Tsai, C. W. Beckett. J. Geophys. Res., 1966, **71**, 2601.
2. D. H. Tsai, C. W. Beckett.— In Book: Behavior of dense media under high dynamic pressure. Symposium HDP, Paris, Dunod, 1968, p. 99.
3. J. B. Gibson, A. N. Goland a. o. Phys. Rev., 1960, **120**, 1229.
4. R. A. Jonson, E. Brown. Phys. Rev., 1962, **127**, 446.
5. Р. Мак-Куин, С. Марш.— В кн.: Динамические исследования твердых тел при высоких давлениях. М., «Мир», 1965.
6. Ван Бюрен. Дефекты в кристаллах. М., ИЛ, 1962.
7. G. R. Cowan. Trans. Met. Soc. AIME, 1965, **233**, 1120.
8. Deformation twinning. Proc. Conf., Gordon, N. Y., 1964.
9. M. L. Wilkins.— In Book: Behavior of dense media under high dynamic pressure. Symposium HDP, Paris, Dunod, 1968, p. 269.
10. С. Б. Кормер. УФН, 1968, **94**, 641.

<sup>1</sup> С. W. Beckett. Частное сообщение.