

Бугуев Р.Д., Калинин А.В., Рудер Д.Д.

Изучение структуры ударнонагруженных материалов методом многогранников Вороного

В физике ударного сжатия одним из основных является гидродинамическое приближение. Согласно этому приближению, вещество при ударном сжатии ведет себя как жидкость, то есть характеризуется отсутствием сдвиговых напряжений. Однако результаты экспериментальных исследований последнего времени показали важность эффектов негидродинамичности в поведении ударносжатых материалов: сложную эволюцию структуры ударной волны, значительные напряжения сдвига, тетрагональные искажения кубических структур [1-3].

Экспериментальные исследования этих эффектов представляют значительные трудности в связи с малыми временами протекания ударно-волнового процесса. Для более детального исследования быстротекущих процессов в последнее время все более широкое применение находят методы компьютерного моделирования [4,5]. Быстрое развитие вычислительной техники и методов компьютерного моделирования (молекулярной динамики и Монте-Карло) дает принципиально новую для физиков информацию — координаты всех атомов изучаемой системы. В результате появляется возможность подойти к проблеме изучения структуры с геометрических позиций.

Для анализа структуры некристаллических систем в последнее время все чаще начинают

применять метод многогранников Вороного (МВ) [6-9]. В данной работе была поставлена задача использовать метод МВ для анализа структуры кристалла, подвергнутого ударному нагружению, на различных стадиях процесса.

В работе проводилось компьютерное моделирование ударного нагружения кубических кристаллов вдоль оси четвертого порядка, при котором решетка претерпевает тетрагональные искажения. Поэтому нами был проведен предварительный теоретический и компьютерный анализ МВ для гранцентрированных тетрагональных (ГЦТ) решеток. Для компьютерного анализа использовалась модель ГЦТ решетки со случайными малыми тепловыми флуктуациями. Результаты распределения параметров МВ в зависимости от степени тетрагональности решетки γ приведены на рис. 1. На этом рисунке распределение по числу ребер на гранях обозначено как E-распределение, распределение по длинам ребер МВ как L-распределение, а распределение по косинусам углов между смежными гранями МВ как cos-распределение. На рис. 1 для ГЦК решетки ($\gamma=1$) приведены распределения с учетом тепловых смещений ($U \neq 0$) и без учета тепловых смещений ($U=0$), которые получены из теоретического анализа.

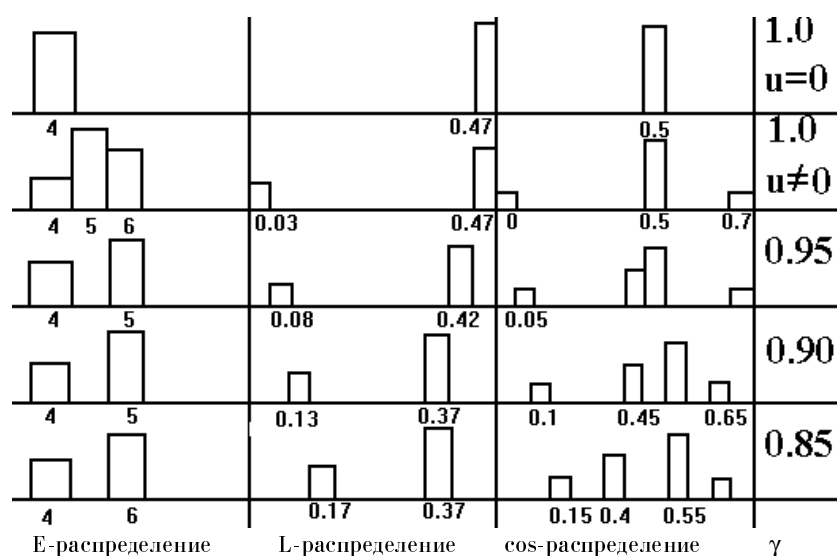


Рис. 1. Распределения по числу ребер (E), длинам ребер (L) и косинусов углов между смежными гранями (cos) МВ ГЦК и ГЦТ решеток при некоторых степенях тетрагональности γ .

Как видно из рис.1, в E-распределении МВ ГЦК решетки с тепловыми смещениями помимо 4-угольных граней, соответствующих идеальной ГЦК решетке, появляются 5-ти и 6-угольные грани, причем 5-угольников всегда больше, чем 4-угольников. В E-распределении для ГЦТ решетки присутствуют только 4-х и 6-угольные грани, независимо от величины тетрагональных искажений. Это наблюдение даст возможность однозначного идентифицирования ГЦТ структуры.

В L-распределении МВ ГЦК решетки с тепловыми флуктуациями появляется пик при малых длинах ребер, что обусловлено снятием вырождения. В L-распределениях МВ для ГЦТ решеток присутствуют два пика, которые с увеличением степени тетрагональности сближаются друг с другом. Изменение длин ребер, соответствующих этим пикам, с изменением степени тетрагональности для ГЦТ решетки определяется следующими формулами:

$$L_1 = \frac{\gamma}{4}(1+2\gamma^2)^{\frac{1}{2}}; \quad L_2 = \frac{1}{2}(1-\gamma^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (1)$$

Обозначив отношение длины большего ребра к длине меньшего ребра $A=L_2/L_1$, из формул (1) можно получить следующую формулу для степени тетрагональности решетки через отношение длин ребер:

$$\gamma = \frac{1+8A^2 - (1+48A^2)^{\frac{1}{2}}}{8A^2 - 4}. \quad (2)$$

На основании этого можно сделать вывод о возможности определения степени тетрагональности ГЦТ решетки по положениям двух пиков в L-распределении МВ для ГЦТ решетки.

Как видно из рис.1, в cos-распределении для ГЦК решетки с тепловыми флуктуациями присутствует три пика, соответствующих углам между смежными гранями МВ, соответственно 90, 60 и 45 градусов.

Для ГЦТ решетки распределение состоит из 4-х пиков, два из которых обусловлены расщеплением пика, соответствующего пику при 60 градусах ГЦК решетки, на два. Положения этих пиков с изменением степени тетрагональности изменяются в согласии с формулами (3):

$$\begin{aligned} \cos \varphi_1 &= \frac{\gamma}{1+\gamma^2}; \quad \cos \varphi_2 = \frac{\gamma}{(2+2\gamma^2)^{\frac{1}{2}}}; \\ \cos \varphi_3 &= \frac{1-\gamma^2}{1+\gamma^2}; \quad \cos \varphi_4 = \frac{\gamma}{(1+\gamma^2)^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Таким образом, из анализа cos-распределений МВ, полученных при компьютерном расчете, также следует возможность определения степени тетрагональности ГЦТ решетки.

МВ был использован нами для изучения структуры ударного фронта твердого тела, полученной стандартным методом молекулярной динамики (ММД). В конкретных расчетах использовался объем (МД-ячейка) в виде параллелепипеда с соотношением сторон 1:1:3. В нем помещалось 640 атомов аргона, которые перво-

начально располагались в узлах ГЦК решетки. Для анализа структуры на разных стадиях ударного нагружения МД-ячейка разбивалась на 10 слоев, как показано на рис.2.

Межатомное взаимодействие аргона описывалось посредством потенциала Леннарда-Джонса:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (4)$$

с параметрами $\epsilon=119,8\text{К}$, $\sigma=3,405\text{Å}$. Дифференциальные уравнения движения частиц решались численно на ЭВМ RISC/6000 по разностной схеме. Шаг интегрирования брали равным 10^{-14} с. Моделирование проводилось до 1200-го шага. На рис. 3 в качестве иллюстрации приведены гистограммы L- и E-распределений МВ на 300-м шаге моделирования в разных сечениях образца. Рассмотрим, как ведет себя E-распределение. Как видно из рис. 3, на первых двух слоях E-распределение одинаково и однозначно указывает на наличие ГЦК структуры с малыми тепловыми смещениями: на распределении присутствуют 4-х, 5-ти и 6-сторонние грани, причем 5-сторонних больше, чем четырехсторонних. Таким образом, ударная волна еще не дошла до второго слоя. Как видно из рис. 3, начиная с третьего слоя число 5-сторонних граней мало что говорит о наличии тетрагональной структуры в этих слоях и может свидетельствовать о достижении ударной волной третьего слоя. Однако, как видно из рис. 3, начиная с седьмого слоя наблюдается монотонное увеличение числа 5-сторонних граней, которое наблюдается вплоть до 10-го слоя, что свидетельствует о том, что на рассматриваемом временном шаге идет процесс релаксации тетрагональной решетки в сторону ГЦК решетки за фронтом ударной волны.

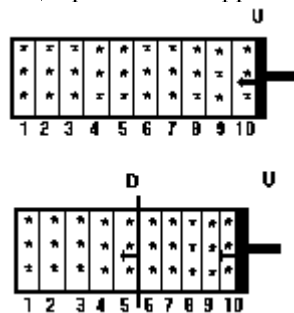


Рис.2. Схематическое изображение МД-ячейки при ударном нагружении в разные моменты времени.

Проанализируем, как меняется L-распределение в зависимости от номера слоя. Как видно из рис.3, на первых двух слоях мы наблюдаем характерное поведение данного распределения для ГЦК структуры, а именно, имеем два пика при значении длин 0.05 и 0.68, соответственно. Расчет величины γ с помощью формулы (2) для первых двух слоев дает единицу. В районе с 3-го по 7-й слой наблюдаются пики при 0.08 и 0.65, что соответствует тетрагональной решетке с $\gamma = 0.9$. Из рис. 3 также

видно, что начиная с седьмого слоя начинают увеличиваться пики, отвечающие за ГЦК структуру - 0.68 и 0.05, что подтверждает выводы о протекании процесса релаксации тетрагональной решетки в сторону кубической, сделанные по результатам анализа E-

распределения.

На рис.4 приведена зависимость номера слоя, до которого дошла ударная волна, от шага моделирования. Используя полученную зависимость, была определена скорость ударной волны: $D = 1487$ м/сек.

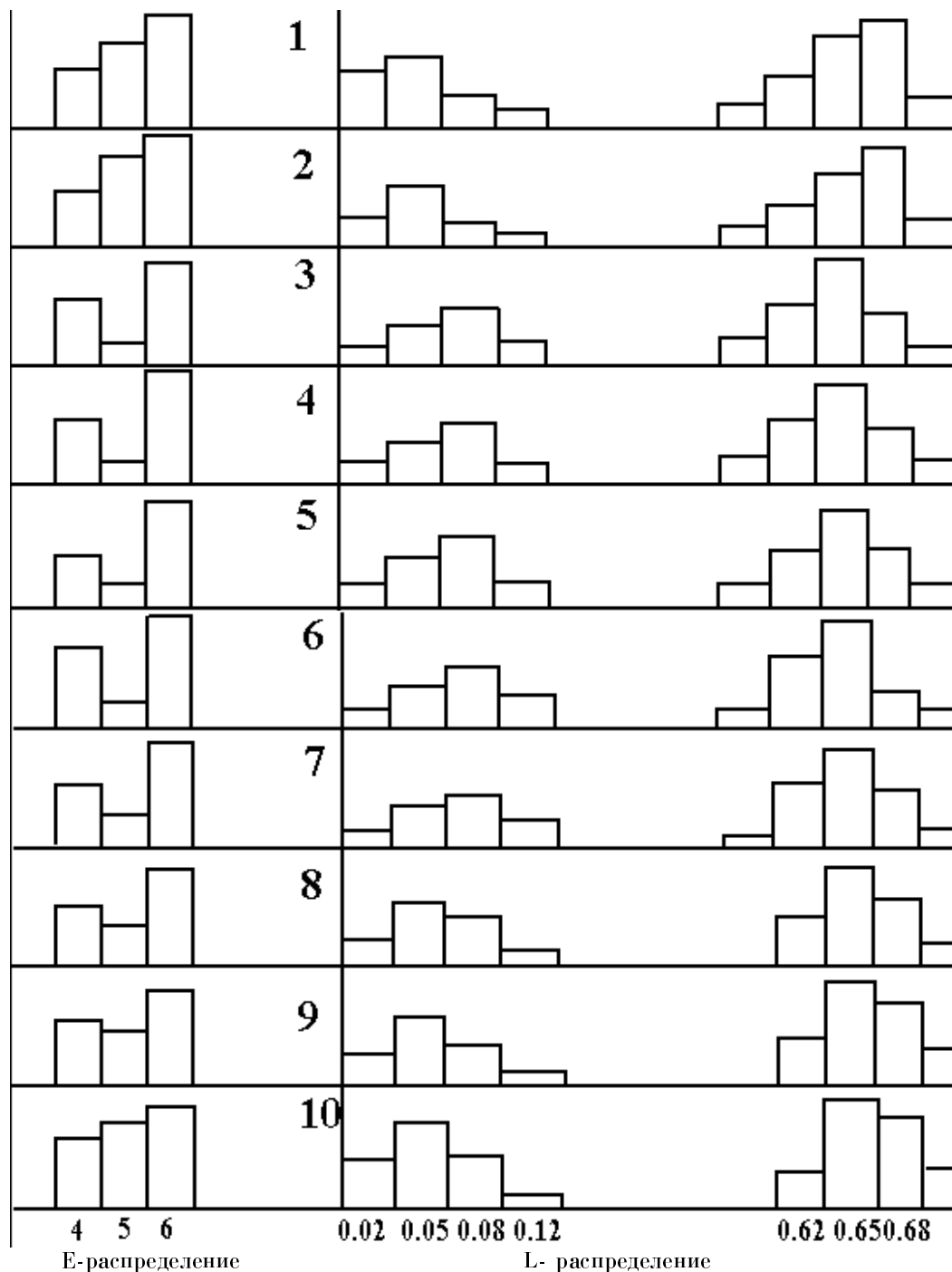


Рис.3 Распределения МВ по числу ребер на гранях (E-распределение) и по длинам ребер (L-распределение) ударнонагруженного кристалла аргона на 300-м шаге моделирования в разных сечениях образца.

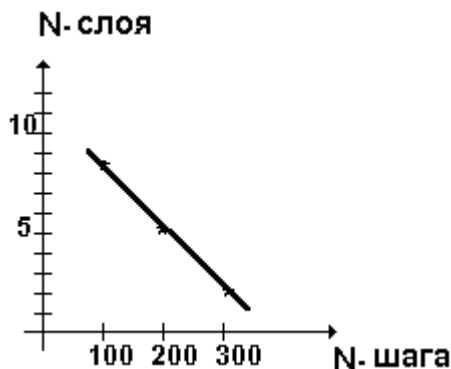


Рис.4. График зависимости номера слоя, до которого дошла ударная волна, от шага моделирования.

Массовая скорость (скорость ударника) для нашего случая небольшая: $U=66$ м/сек., поэтому скорость ударной волны должна быть близка к скорости звуковой волны, которая в нашем случае равна 1320 м/сек. Таким образом, наблюдается неплохое согласие между рассчитанной нами скоростью ударной волны и ее экспериментальным значением.

Основные результаты и выводы работы

Получены и проанализированы математические выражения для длин ребер и косинусов углов между смежными гранями МВ для ГЦТ решеток в зависимости от степени тет-

рагональности решетки. Показано, что распределения параметров МВ позволяют отличить кубическую и тетрагональную идеальные решетки друг от друга и определить параметр тетрагональности.

С помощью составленной программы был проведен анализ МВ для ГЦТ решеток с малыми тепловыми флуктуациями. Показано, что распределения параметров МВ, полученные при компьютерном расчете, также позволяет различить кубические и тетрагональные решетки с малыми тепловыми флуктуациями и определять параметр тетрагональности.

Была исследована структура компьютерной модели кристаллического аргона, состоявшей из 640 атомов, подвергнутого ударному нагружению. При этом показано:

а) что непосредственно за фронтом ударной волны происходит переход ГЦК решетки в ГЦТ решетку со степенью тетрагональности $\gamma = 0.9$. Показано, что через промежуток времени, равный $2 \cdot 10^{-12}$ сек, начинается процесс релаксации ГЦТ решетки в ГЦК решетку;

б) что метод МВ позволяет определить положение фронта ударной волны. Определена скорость ударной волны, которая неплохо согласуется с экспериментальным значением.

Литература

1. Батьков Ю.В., Новиков С.А. Журн. прикл. мех-ки и техн. физики, 1980, 6, С.95.
2. Chartagnac P.F. J.Appl.Phys., 1982, 53, 2, 948.
3. Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов.-М.: Наука, 1974.-384с.
4. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.-М.: Наука, 1990.
5. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике.- М.: Мир, 1990.
6. Medvedev N.N.J. Comput. Phys., 1986, 67, 223.
7. Finney J.L.J. Comput. Phys., 1979, 32, 137.
8. Tanemura M., Hiwatari Y., Matsuda H., Ogawa T., Ogita N., and Ueda A. Prog. Theor. Phys., 1977, 58, 1079.
9. Медведев Н.Н. Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических упаковок: Учеб. пособие. Новосиб. ун-т. Новосибирск, 1994.