

И. Ф. Головнев, Е. И. Головнева, Л. А. Мерзиевский
**Моделирование трансформации структуры
нанокристалла при ударном нагружении***

I. F. Golovnev, E. I. Golovneva, L. A. Merzhievsky
**Modeling of Nanocrystal Structure Transformation under
Shock Loading**

Исследованы изменения структуры нанокристалла меди, вызванные прохождением ударных волн различной интенсивности. Детально проанализированы изменения плотности, скорости центров масс, температуры и потенциальной энергии мезообъемов в разные моменты времени. Установлены интервалы амплитуд ударных волн, на которых наблюдаются разные механизмы диссипации энергии. В расчете наблюдается образование множества дефектов структуры, в том числе и аналогичных дислокациям. Показано, что существует предельная внешняя нагрузка, при достижении которой в нанокристалле с идеальной кристаллической решеткой происходит скачкообразное изменение механизма поглощения энергии. Полученные данные показывают, что в пластической волне происходит аморфизация структуры.

Ключевые слова: ударная волна, трансформация структуры, молекулярно-динамическое моделирование.

DOI 10.14258/izvasu(2014)1.1-08

Введение. Современное состояние моделирования процессов в конденсированных средах при умеренных и высокоинтенсивных нагрузках характеризуется высоким уровнем развития вычислительных возможностей. В то же время механизм необратимых процессов в ударной волне еще не достаточно изучен как в экспериментальных, так и в расчетных работах. В связи с этим в настоящей работе была поставлена цель изучения реакции нанокристалла на внешнюю нагрузку, варьированием которой можно регулировать поток поступающей в систему энергии. Для решения поставленной задачи используется метод молекулярной динамики. Изучаются микроструктурные процессы в нанокристалле меди при воздействии приложенных импульсов напряжений. Одна из целей данного исследования — выявление эффектов самоорганизации в формировании новых структурных состояний.

We present the study of copper nanocrystal structure changes caused by transmission of shock waves with varying intensity. Changes of density, mass center velocities, temperature, and meso-volumes potential energy are thoroughly analyzed. We obtain the intervals of shock wave amplitudes where different mechanisms of energy dissipation are observed. The simulation reveals buildup of many structural defects similar to dislocation. It is shown that there is a limit of external load, and the excess of it causes an abrupt change of energy dissipation mechanism. The data obtained demonstrate structure amorphization in a plastic wave.

Key words: shock wave, nanocrystal transformation, molecular dynamics simulation.

Физическая модель. Рассматривается нанокристалл меди в форме прямоугольного параллелепипеда, ориентированного в плоскости (1,0,0), размеры которого составляли 50*5*5 кристаллических ячеек вдоль осей координат XYZ соответственно. Для описания межатомного взаимодействия использован многочастичный потенциал А. Воутера [1]. Для начального состояния с использованием метода искусственной вязкости [2] рассчитывались координаты и импульсы атомов, соответствующие глобальному минимуму потенциальной энергии («охлаждение») системы. Внешнее возмущение генерируется с помощью импульса силы, имеющего вид функции Хевисайда. Величина импульса определяется внешним постоянным сжимающим напряжением σ_0 , действующим на левую боковую грань, лежащую в начальный момент в плоскости $X=0$. Весь нанокристалл вдоль оси X разбивается на мезообъе-

* Работа выполнена при финансовой поддержке интеграционных проектов СО РАН – Уро РАН №64 «Разработка широкодиапазонных определяющих уравнений для описания поведения конденсированных сред при умеренных и высокоинтенсивных нагрузках» и СО РАН – ДВО РАН №78 «Разработка мультидисциплинарных моделей самоорганизации полей напряжений и развития нелинейных волн массопереноса на интерфейсах разнородных сред» и гранта РФФИ (проект 12-01-00726-а).

мы по $a/2$ длиной. В начальный момент времени в каждом мезообъеме содержится по одной атомной плоскости.

Исследование диссипации механической энергии. Наиболее репрезентативной характеристикой процесса является полная энергия, поглощенная системой под влиянием внешней нагрузки (рис. 1). Детальный анализ результатов расчетов показал, что для потенциальной и кинетической энергий наблюдается аналогичный характер зависимостей. Рассмотрение перечисленных энергетических характеристик позволяет выделить на полученных графиках, в зависимости от амплитуды внешнего воздействия, три характерных интервала:

- 1) $\sigma_0 \leq 2.6$ ГПа . Зависимость всех компонент энергии от приложенного напряжения близка к квадратичной, что говорит об упругом характере процесса сжатия кристалла;
- 2) $2.6 \leq \sigma_0 \leq 2.8$ ГПа . Наблюдается практически скачкообразный переход к третьему интервалу;
- 3) $2.8 \leq \sigma_0 \leq 4$ ГПа . На этом интервале наблюдается близкий к линейному рост полной энергии с увеличением внешней нагрузки.

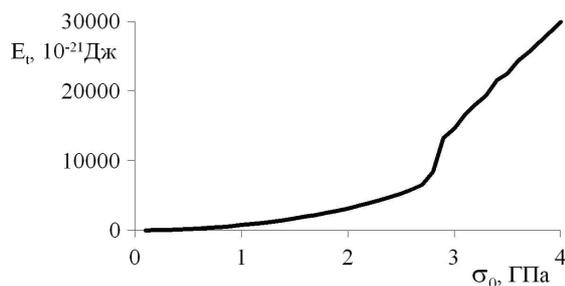


Рис. 1. Зависимость приращения полной энергии от величины внешнего напряжения

Для характеристики перехода внешнего структурированного механического воздействия в тепловую «бесструктурную» энергию в работе использовано следующее соотношение:

$$Diss = \frac{E_{in}}{E_t} \cdot 100\%,$$

которое названо коэффициентом диссипации (рис. 2). Показано, что наблюдающееся поведение коэффициента диссипации связано с необратимостью деформаций кристаллической структуры или, другими словами, с пластическими деформациями, возникающими под влиянием внешнего сжимающего напряжения.

Исследование кристаллической структуры в волне необратимых деформаций. Для исследования кристаллической структуры вещества используется парную функцию распределения:

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \cdot \frac{1}{4\pi r^2} \frac{\Delta N}{\Delta r},$$

которая рассчитывалась в каждой мезоячейке. Здесь V , N — объем мезоячейки и число атомов в мезоячейке.

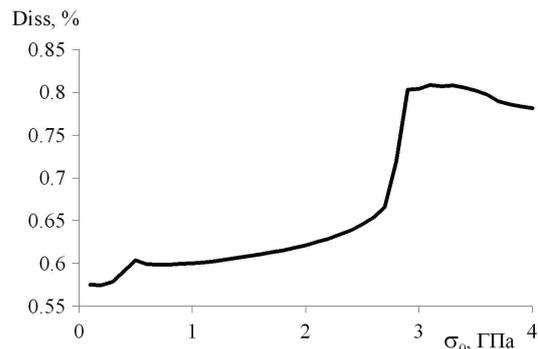


Рис. 2. Зависимость отношения приращения внутренней энергии структуры к ее полной энергии от величины внешнего напряжения

На рисунке 3 показано изменение кристаллической структуры (расположения атомов) для того интервала внешних воздействий, где имеют место необратимые деформации ($\sigma_0 = 3.6$ ГПа, время импульса — $T_\sigma = 6$ пс). Парная функция распределения в области развитой волны необратимых изменений представлена на рисунке 4. Как видно, после прохождения волны нагрузки сохраняется только первый пик (ближний порядок), следовательно, вещество находится в аморфном (квазижидком) состоянии. Охлаждение приводит к восстановлению кристаллической структуры ГЦК-решетки, но с наличием двойных пиков около третьего, четвертого и шестого пиков, что косвенно свидетельствует о появлении дефектов структуры.

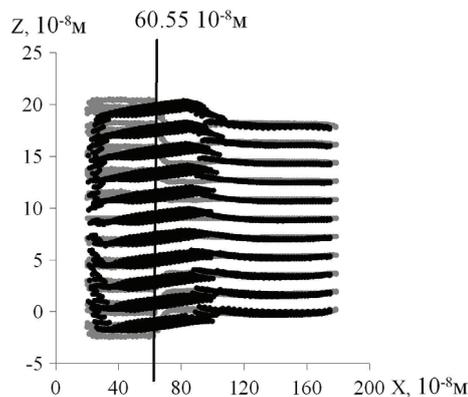


Рис. 3. Расположение атомов в пространстве в плоскости XZ. Серые кружки — расположение атомов в момент прихода волны, черные кружки — атомы охлажденной системы

Аналогичный анализ был проведен для разных областей кристалла. С помощью парной функции распределения были выявлены области кристалла, в которых происходят необратимые (пластические) микродеформации, и изучено распространение этих необратимых изменений структуры по кристаллу в зависимости от приложенной внешней нагрузки.

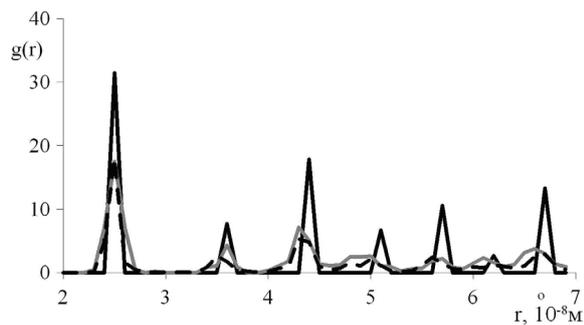


Рис. 4. Парная функция распределения.

Черная линия — идеальный кристалл, серая линия — деформированный кристалл в момент отключения внешнего воздействия; черная пунктирная линия — охлажденный деформированный кристалл.

Мезоячейка с координатой 6.055 нм

Заключение. Таким образом, в работе установлено, что при внешней нагрузке, меньше критической, поглощенная энергия расходуется по двум

каналам: 1) на поддержку движения упругой волны; 2) на увеличение кинетической энергии центра масс системы.

При превышении критического значения внешнего напряжения в нанокристалле с идеальной кристаллической решеткой происходит скачкообразная перестройка механизма поглощения энергии, при этом поток полной энергии превышает потоки по этим каналам. Возникает волна необратимых изменений структуры, в которой идеальная кристаллическая решетка переходит в аморфное состояние. Процесс сопровождается появлением ротационной составляющей деформации, вызванной прохождением волны. На поддержку этой волны требуется гораздо больше энергии, при этом формируется стационарный, но термодинамически неравновесный процесс.

Авторы благодарны академику В. Е. Панину за подробное, плодотворное обсуждение результатов работы, во многом определившее их трактовку.

Библиографический список

1. Voter A.F. Embedded Atom Method Potentials for Seven FCC Metals: Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, and Al // Los Alamos Unclassified Technical Report # LA-UR 93-3901. — 1993.

2. Головнева Е. И., Головнев И. Ф., Фомин В. М. Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики // Физическая мезомеханика. — 2003. — Т. 6, № 6.