

01;05
©1995

О НЕЛИНЕЙНОМ ОТКЛИКЕ МАТЕРИАЛА ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ. АТОМНЫЙ УРОВЕНЬ

С.Г.Псахе, К.П.Зольников, С.Ю.Коростелев

Одним из наиболее ярких проявлений нелинейного поведения твердого тела в условиях механического нагружения является возникновение и распространение уединенных волн со специфическими свойствами — солитонов. Теоретическому исследованию этого явления на атомном уровне посвящены многочисленные работы. Как правило, при численном моделировании солитоны иницируются путем приложения импульсного нагружения на одном из концов исследуемого образца. Поэтому большая часть работ в этой области посвящена изучению закономерностей распространения солитонов в одномерном приближении [1,2] и чаще всего для ударно-волнового нагружения атомных цепочек [3-6] (в такой постановке направление распространения солитона и нагружающего импульса совпадает). Для изучения возможности образования уединенных волн типа солитонов в реальном материале необходимо рассматривать трехмерный (3-D) образец. При ударно-волновом нагружении реальных трехмерных материалов вследствие их гетерогенности всегда существуют области, подверженные высокоскоростной сдвиговой деформации [6]. Следует отметить, что при больших сдвиговых деформациях может иметь место ряд необычных эффектов [6-8], таких как аномально

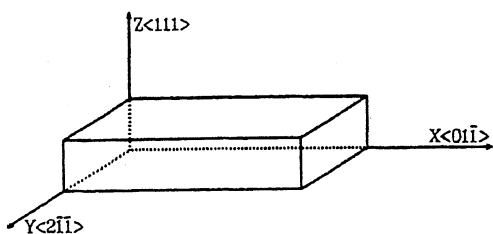


Рис. 1. Схема ориентации плоскостей моделируемого кристаллита.

высокие скорости массопереноса, течение материала без сопротивления сдвигу и т. д. Поэтому изучение отклика материала на атомном уровне в условиях высокоскоростной сдвиговой деформации представляет интерес как с научной точки зрения, так и с точки зрения возможных практических приложений.

В настоящей работе эта проблема исследовалась методом молекулярной динамики, а объектом моделирования являлся 3-D кристаллит Al при $T = 0$ К (рис. 1), содержащий более 4000 атомов. Параметры эффективного парного потенциала взаимодействия определялись на основе теории псевдопотенциала, как, например, в [9,10]. При расчетах использовалась атомная система единиц, в которой боровский радиус, постоянная Планка, масса и заряд электрона равны единице. Шаг по времени (Δt) составлял 100 атомных единиц (ат. ед.) времени.

Схема нагружения такова:

— для моделирования высокоскоростного сдвигового нагружения атомам в крайних плоскостях YZ (рис. 1) присваивались скорости $v_z = v_x = 0$, $v_y^l = 10^{-4}$ ат. ед., $v_y^r = 1.5 \cdot 10^{-4}$ ат. ед. (где v_y^r — y -я составляющая скорости на правом краю образца, а v_y^l — y -я составляющая скорости на левом краю образца);

— в направлениях, нормальных остальным граням, использованы периодические граничные условия.

Поскольку в соответствии с [11–12] “быстрый” отклик моделируемого образца на возмущение может быть выявлен на основе анализа полей скоростей атомов, то в настоящей работе поля скоростей строились каждые 10 шагов интегрирования уравнений движения. На рис. 2 показана эволюция проекции поля скоростей на плоскость XZ для восьми плотноупакованных плоскостей (на рис. 1 им соответствуют плоскости XY), а на рис. 3 приведены проекции поля скоростей в различные моменты времени на одну из плотноупакованных плоскостей.

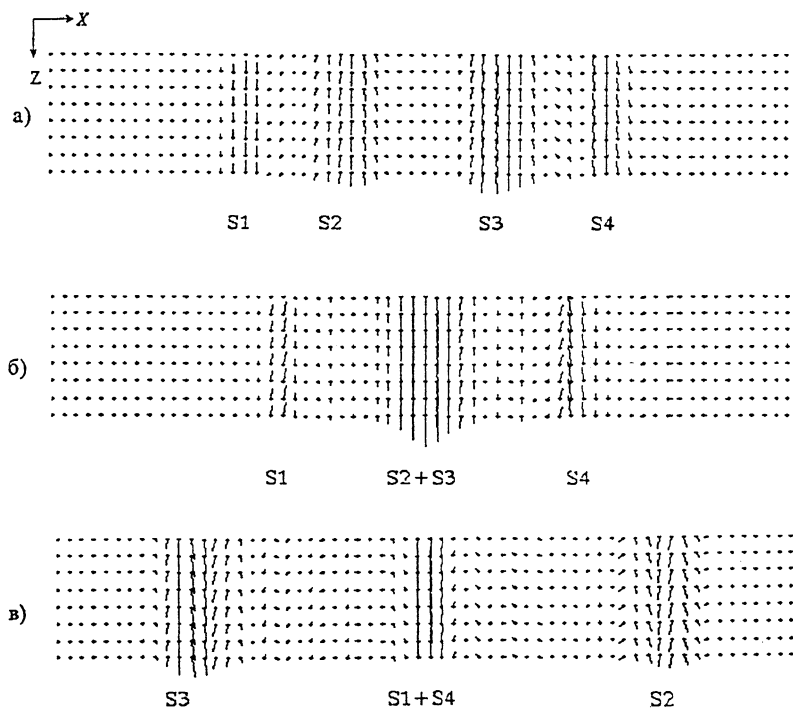


Рис. 2. Проекция поля скоростей атомов на плоскость (211) в момент времени: *a* — $t = 320\Delta t$; *b* — $t = 400\Delta t$; *c* — $t = 720\Delta t$.

На приведенных рисунках хорошо видно, что под воздействием высокоскоростного сдвигового напряжения в материале формируются уединенные импульсы, которые движутся в направлении, нормальном к приложенному сдвигу. Проведенные исследования показали, что наблюдаемые уединенные импульсы являются устойчивыми и скорость их движения пропорциональна амплитуде импульса.

Некоторые особенности взаимодействия уединенных импульсов друг с другом показаны на рис. 2 и 3, из которых видно, как сформированные импульсы движутся навстречу друг другу. Уединенные волны *S1* и *S2* движутся от левой границы, а *S3* и *S4* — от правой (рис. 2, *a*; 3, *a*). На рис. 2, *b* и 3, *b* можно видеть состояние моделируемой системы в момент взаимодействия уединенных волн *S1* и *S3*, а на рис. 2, *c* и 3, *c* — в момент взаимодействия *S1* и *S4*. Из данных рисунков следует, что наблюдаемые уединенные волны, как и солитоны в одномерном случае, восстанавливаются даже после взаимодействия с двумя разнонаправленными импульсами. Кроме того, сравнение взаимного положения

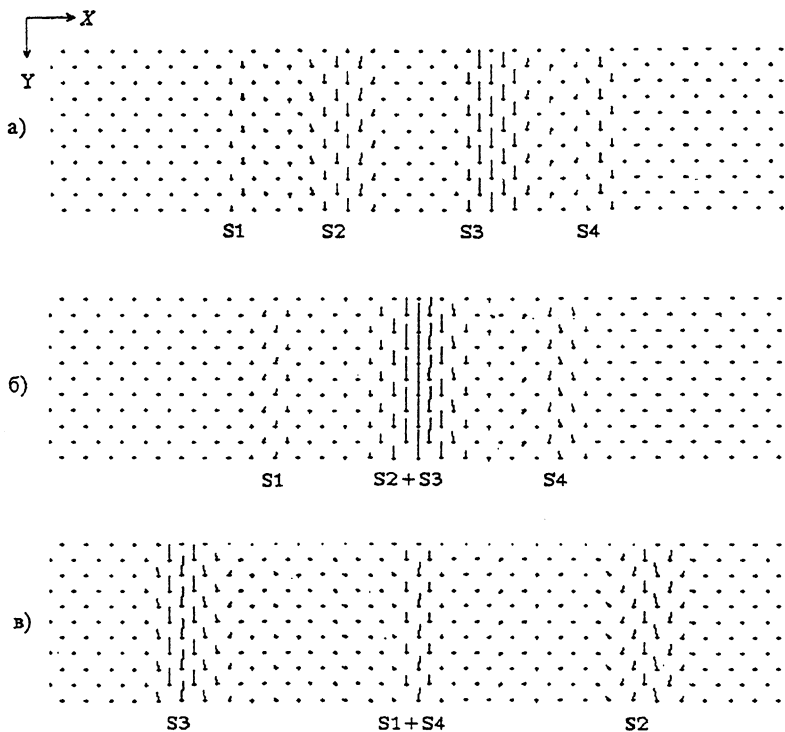


Рис. 3. Проекция поля скоростей атомов на плоскость (111) в момент времени: а — $t = 320\Delta t$; б — $t = 400\Delta t$; в — $t = 720\Delta t$.

пар импульсов $S1-S2$ и $S3-S4$ в моменты времени $t = 320\Delta t$ (рис. 2, а и рис. 3, а) и $t = 720\Delta t$ (рис. 2, в и рис. 3, в) показывает, что скорость наблюдаемых уединенных волн пропорциональна их амплитуде.

Таким образом, впервые показано, что при высокоскоростной сдвиговой деформации в 3- D кристалле формируются солитонно-подобные возбуждения, которые распространяются в направлении, нормальном плоскости приложения сдвига. Следует ожидать, что их взаимодействие с неоднородностями структуры может оказывать существенное влияние на отклик реальных материалов при высокоскоростном нагружении или ударно-волновом воздействии.

Список литературы

- [1] *Toda M* // Springer series in solid state sciences. V. 20. Theory of nonlinear lattices (Springer, Berlin, 1981).
- [2] *Neuper A., Gaididei Yu., Flytzantis N., Mmertens F.* // Phys. Lett. 1994. A190. P. 165-171.
- [3] *Watanabe S., Toda M.* // J. Phys. Soc. Japan. 1981. V. 50. P. 3446-3449.

- [4] *Klinker T., Lauterborn W.* // *Physica (D)*. 1983. V. 8. N 2. P. 249-256.
- [5] *Коростелев С.Ю., Псахье С.Г., Панин В.Е., Фадеев В.А.* // *Изв. вузов. Физика. Деп. ВИНТИ*. 1985. С. 2-36.
- [6] *Псахье С.Г., Коростелев С.Ю.* // *Структурные уровни пластической деформации и разрушения*. Новосибирск: Наука, 1990. С. 204-231.
- [7] *Ениколопян Н.С.* // *ДАН СССР*. 1985. Т. 251. С. 283-286.
- [8] *Ениколопян Н.С.* // *ЖФХ*. 1989. Т. 63. № 9. С. 1261-1265.
- [9] *Псахье С.Г., Панин В.Е.* // *ФММ*. 1980. Т. 50. С. 620-624.
- [10] *Psakhe S.G., Alekseev S.V., Panin V.E.* // *Phys. Stat. Sol. (B)*. 1989. V. 153. k11-k14.
- [11] *Псахье С.Г., Коростелев С.Ю., Негрескул С.И., Зольников К.П., Ванг Ж., Ли Ш.* // *Письма в ЖТФ*. 1994. Т. 20. В. 1. С. 36-39.
- [12] *Псахье С.Г., Дмитриев А.И.* // *ЖТФ*. 1994. Т. 64. В. 8. С. 186-190.

Институт физики
прочности и материаловедения
СО РАН
Томск

Поступило в Редакцию
5 апреля 1995 г.