

О ВОЗНИКНОВЕНИИ ОБЛАСТЕЙ С РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СТРУКТУРОЙ ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В КРИСТАЛЛЕ

С.Г. Псахье, С.Ю. Коростелев,
В.Е. Панин

Ряд важных процессов при ударноволновом нагружении твердого тела определяется переходом некоторых областей материала в особое состояние [1-3]. Это состояние, согласно [2], характеризуется поведением, подобным идеальной несжимаемой жидкости, и высокой подвижностью атомов.

В то же время не существует экспериментальных методов, позволяющих наблюдать ионную подсистему при прохождении ударной волны, поскольку при этом наряду с пространственной $\sim 10 \text{ \AA}$ необходима высокая временная $\sim 10^{-12}$ с разрешающая способность.

Таким образом, микроскопическое исследование поведения материала при распространении ударной волны может быть проведено лишь на основе прямого моделирования методом молекулярной динамики, как это делалось, например в [4-7]. Характерно, что несмотря на достаточно большое количество работ в рамках этого метода, прямого подтверждения необычного с точки зрения традиционных механизмов поведения материала получено не было. При этом следует отметить, что практически во всех случаях авторы рассматривали ударную волну с плоским фронтом. На практике идеально плоская форма фронта практически недостижима даже в специально поставленных экспериментах. Это обусловлено характером нагружения, формой и размерами нагружаемого образца, а также наличием дефектов и неоднородностей различного типа и масштаба.

В настоящей работе на основе метода молекулярной динамики рассматривалось распространение ударной волны в кристаллите, содержащем включение из двухсот атомов с массой $m = 2m_0$ (m_0 - масса атома матрицы). Весь кристаллит включал в себя $\sim 10^4$ атомов; по оси Y использовались периодические граничные условия. Расположение включения схематически показано на рис. 1,а. В момент времени $t = 0$ на границе кристаллита соответствующей $y = 0$ инициировалась ударная волна с идеально плоским фронтом (для этого рассмотрение велось при $T = OK$). Расчеты проводились для $\alpha - Fe$.

При прохождении включения форма фронта искажалась. На рис. 1 приведены функции радиального распределения (RDF), рассчитанные в области, ограниченной на схеме пунктирными линиями. На рис. 1,а приведена RDF , полученная в кристаллите без включения; видно, что она дискретна, при этом ее искажение относительно идеальной (исходной) структуры обусловлено одноосным сжатием. Наличие включения, как следует из рис. 1,б принципиально изменяет вид RDF , она становится непрерывной. Это связано с существ-

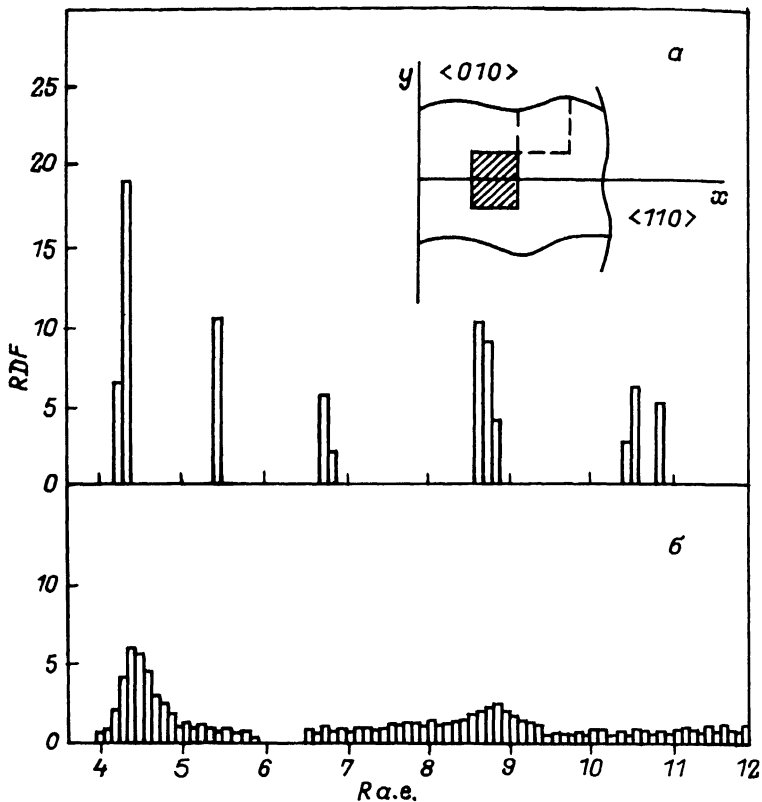


Рис. 1. Заштрихованный квадрат - включение с $m = 2m_0$. Значения R приведены в атомных единицах [7].

венным изменением характера поведения атомов в условиях более сложного, чем одноосное сжатие, нагружения. Поведение материала в состояниях, соответствующих RDF (рис. 1, а и б), заметно отличается, что можно видеть, в частности, из сравнения рис. 2, а и б, где приведена зависимость $E_{\alpha}^K(n)$:

$$E_{\alpha}^K(n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_n} m_i V_{i\alpha}^2;$$

α принимает значения x, y ; i - нумерует атомы n -го слоя с $y = const$ ($1 \leq i \leq N_n$); m_i - масса, а $V_{i\alpha}$ - компонента скорости i -го атома.

Для изучения влияния структуры материала на $E_{\alpha}^K(n)$ был проведен расчет распространения ударной волны в аморфном материале

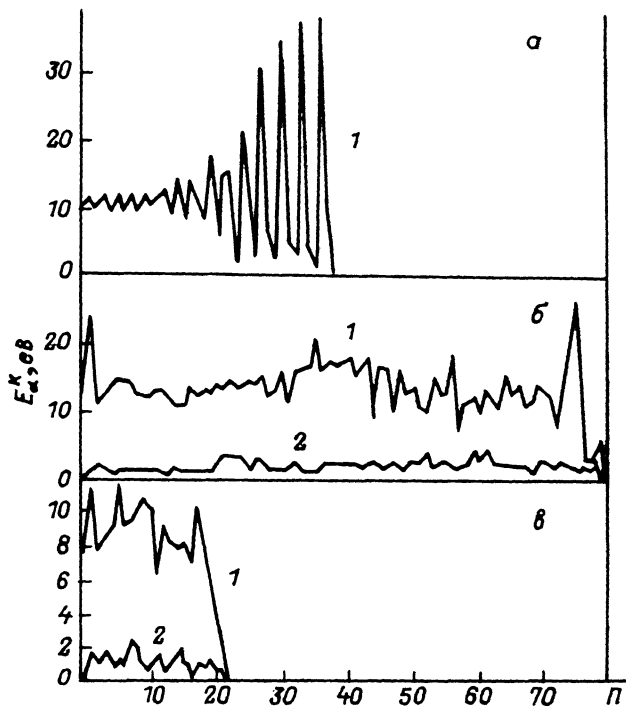


Рис. 2. Характерный вид зависимости $E_{\alpha}^K(r)$: а) для кристаллита без включения; б) для кристаллита с включением; в) для аморфного материала.

(рис. 2,в). Следует отметить, что для исходного аморфного материала и для кристалла со структурой разупорядоченной при взаимодействии ударной волны с включением характер поведения $E_{\alpha}^K(r)$ имеет много общего.

Искажение плоской формы фронта ударной волны может происходить также вследствие взаимодействия с термическими флуктуациями, но этот вопрос практически не изучался, хотя работы по моделированию ударной волны при $T > OK$ проводились [4, 6]. При этом наблюдалась так называемая зона неустойчивости, характеризующаяся резким, осциллирующим возрастанием кинетической энергии, но структура этой зоны не исследовалась. В то же время проведенный в работах авторов анализ структуры зоны неустойчивости, обусловленной локальным нагружением [7], показал, что ее возникновение связано с формированием областей, характеризующихся непрерывной функцией распределения.

Таким образом, из проведенных исследований следует, что при распространении ударной волны с искажениями на фронте материал переводится в неустойчивое состояние, которое характеризуется непрерывной, аморфоподобной функцией радиального распределения. При этом, как показывает анализ поля скоростей в различные моменты времени, эти области не смешиваются как целое, а как бы текут. Полученные результаты показывают также, что микроскопическое исследование особенностей поведения материала при распространении ударной волны целесообразно проводить с учетом ее реальной структуры.

Л и т е р а т у р а

- [1] O b e r g A., M a r t e n s o n N., S c h i v e t i z Y.A. - Metallurg. Transactions, 1985, v. 16A, N 5, p. 841-852.
- [2] Бондарь М.П., Оголихин В.М. - ФГВ, 1988, т. 24, № 1, с. 122-127.
- [3] Теплов В.А., Талуц Г.Г., Маслов Р.А. и др. Фундаментальные проблемы физики ударных волн, Азау, 18-21 мая 1987, Тезисы докладов, Черноголовка, 1987, с. 83-85.
- [4] T s a i D.H., M c D o n a l d R.A. - High Temp. High Press., 1976, v. 8, N 4, p. 403-418.
- [5] P o w e l J.D., B e t t e h J.H. - J. Appl. Phys., 1980, v. 51, N 4, p. 2050-2055.
- [6] Могилевский М.А., Мынкин И.О. - ФГВ, 1985, т. 21, № 3, с. 113-120.
- [7] Псахье С.Г., Коростелев С.Ю., Панин В.И. X Международная конференция по высокоэнергетическому воздействию на материалы, Новосибирск, 18-22 августа 1986, с. 111-115.

Поступило в Редакцию
12 мая 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 14, вып. 18

26 сентября 1988 г.

ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНТНАЯ ТОНКОПЛЕНОЧНАЯ МДПДМ СТРУКТУРА, ОСАЖДЕННАЯ ХИМИЧЕСКИМ ПАРОФАЗНЫМ МЕТОДОМ

А.И. Дяденко, М.Я. Рахлин,
В.Е. Родионов

Тонкопленочные электролюминесцентные МДПДМ структуры находят широкое применение в различных системах отображения ин-