

05

О нелинейном механизме переноса энергии фронтом возмущения при локальном высокоэнергетическом нагружении

© С.Г. Псахье, К.П. Зольников, И.А. Костин

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
E-mail: psakhie@yahoo.com

Поступило в Редакцию 28 августа 2001 г.

Изучены особенности распространения возмущения в кристаллите меди при локальном высокоэнергетическом нагружении. Исследования проводились на основе метода молекулярной динамики с использованием многочастичных потенциалов, рассчитанных в рамках метода погруженного атома. Показано, что в кристаллите формируется нелинейный уединенный импульс, который в отличие от линейного возмущения, способен переносить энергию с высокой плотностью на относительно большие расстояния. Глубина переноса энергии определяется как площадью, так и скоростью локального нагружения.

Высокоэнергетическое воздействие на материал может приводить к формированию волн различной природы. В частности, вследствие нелинейности межатомного взаимодействия, в материале могут генерироваться и распространяться нелинейные (солитонобразные) волны. Особенности распространения таких волн исследовались первоначально применительно к одномерным цепочкам, затем в системах с большей размерностью [1–5]. Расчеты показывают, что в материалах с идеальной структурой нелинейные волны распространяются фактически без диссипации энергии. При этом следует отметить, что в случае 2D и 3D моделирование проводилось с использованием периодических граничных условий, т. е. не учитывалось явно влияние краевых эффектов. По этой причине фактически не изученными остаются вопрос о влиянии локальности нагружения на генерацию и характер распространения нелинейных импульсов.

В связи с этим в настоящей работе была поставлена задача: исследовать особенности распространения возмущений, которые генерируются

в кристаллите в результате локального высокоэнергетического воздействия на свободную поверхность.

Поставленная задача решалась на основе метода молекулярной динамики с использованием многочастичных потенциалов, рассчитанных в рамках погруженного атома [6,7]. Высокоэнергетическое воздействие моделировалось путем задания направленного импульса в некоторой приповерхностной области по аналогии с [8,9]. Расчеты проводились для кристаллитов меди, содержащих 16 000, 32 000, 50 000, 75 000 атомов и имеющих форму параллелепипеда, ребра которых были сонаправлены с кристаллографическими направлениями [100], [010], [001] (рис. 1, *a*). Вдоль направлений [001] и [010] моделировались периодические граничные условия, вдоль [100] — свободные поверхности.

Нагружаемая область имела форму прямоугольника (схема нагружения показана на рис. 1, *a*). Атомам свободной поверхности, попавшим в эту область, присваивались скорости, которые для различных расчетов варьировались в интервале от 3000 до 4000 м/с.

Результаты моделирования показали, что в результате локального нагружения свободной поверхности в кристаллите формируется уединенный импульс. Распределение атомных скоростей внутри уединенного импульса в различные моменты времени для скорости локального нагружения 3000 м/с показано на рис. 1, *b* и *c*. Хорошо видно, что при локальном нагружении образца распространение уединенного импульса носит выраженный нелинейный характер, а именно: исходная высокая плотность энергии внутри сформированного импульса сохраняется в течение достаточно большого промежутка времени (иногда вплоть до достижения им тыльной поверхности моделируемого кристаллита).

На основе полученных результатов проведено сравнение изменения плотности энергии на фронте возмущения в рамках линейного приближения (сферический фронт) и в рамках настоящей модели (нелинейная, уединенная волна). Величина нагружения в этом случае составляла 3000 м/с. Результаты анализа приведены на рис. 2, где показана плотность энергии в относительных единицах (максимальное значение фактически соответствует первоначальному значению плотности энергии на фронте возмущения).

Из рис. 2 видно, что высокая плотность энергии во фронте может сохраняться вплоть до достаточно больших глубин проникновения, хотя размер области с высокой плотностью энергии уменьшается по мере распространения импульса (рис. 1, *b, c*).

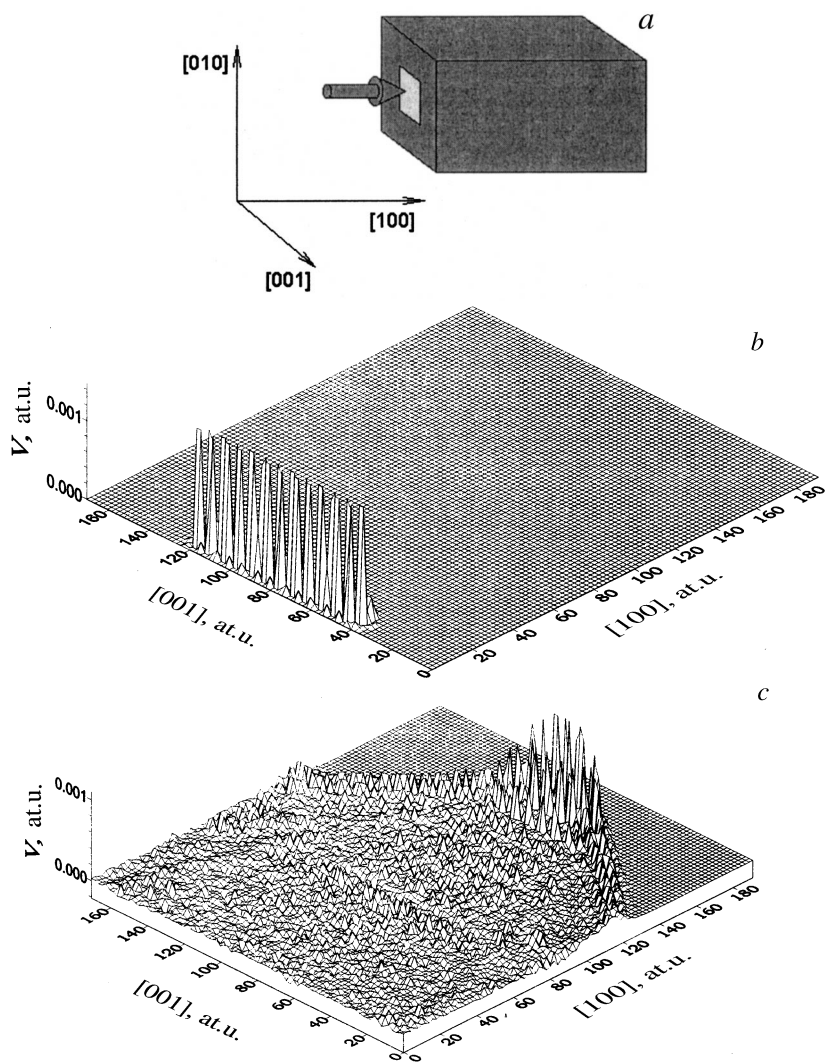


Рис. 1. *a* — схема нагружения; распределение атомных скоростей в уединенном импульсе: *b* — 10 временной шаг, *c* — 450 временной шаг.

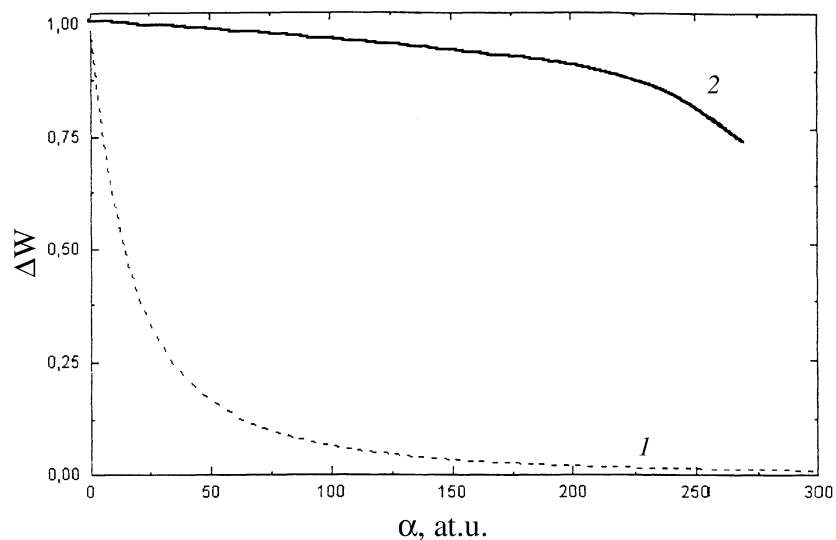


Рис. 2. Распространение импульса в линейном и нелинейном приближениях. 1 — линейный импульс; 2 — нелинейный импульс (ΔW — изменение энергии, d — глубина проникновения).

Анализ полученных результатов показал, что глубина проникновения импульса при сохранении в нем исходной высокой плотности энергии зависит от размеров площади нагружения. Так, из рис. 3, *a* видно, что увеличение площади нагружения приводит к тому, что исходная высокая плотность энергии в импульсе сохраняется до больших глубин проникновения. Естественно ожидать, что устойчивость нелинейного импульса и глубина переноса исходной высокой плотности будут определяться интенсивностью локального нагружения. Для изучения особенностей этой зависимости к площадке одинакового размера прикладывалось различное нагружение, величина которого варьировалась от 3000 до 4000 м/с. Результаты моделирования представлены на рис. 3, *b*.

Таким образом, процесс потери энергии нелинейным импульсом осуществляется через границы раздела импульса с невозмущенной частью кристаллита. По мере распространения нелинейного возмущения протяженность этой границы раздела уменьшается (за счет уменьшения размеров области с высокой плотностью энергии).

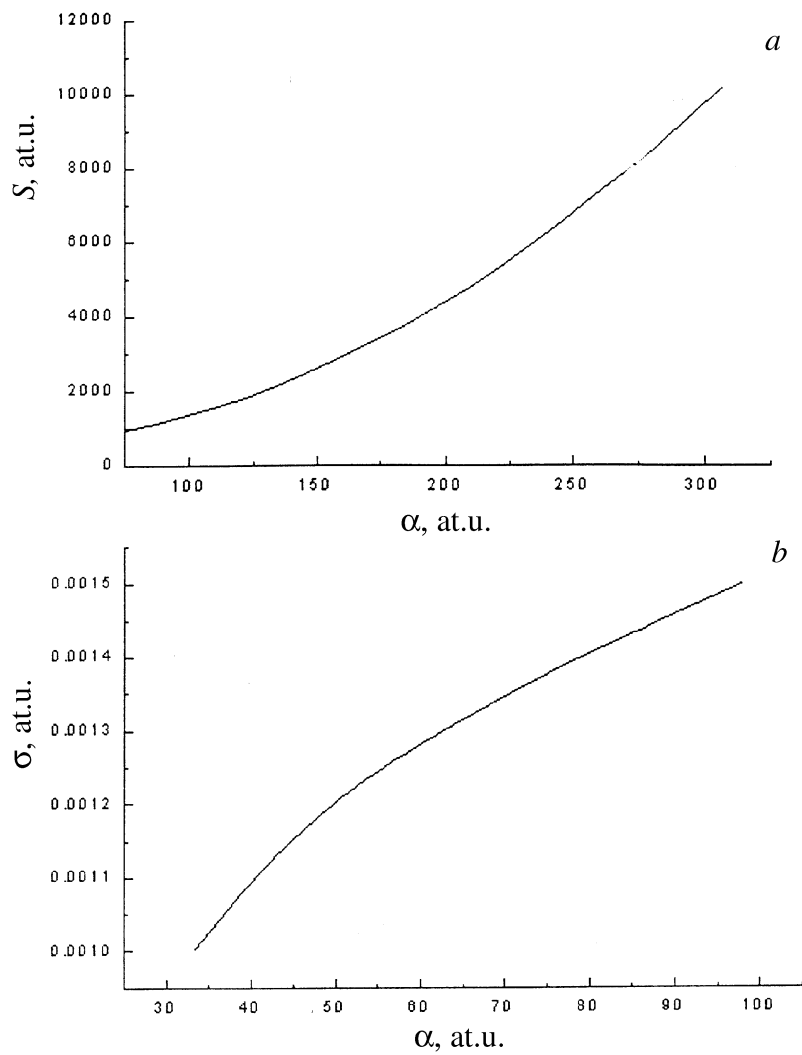


Рис. 3. Зависимость глубины проникновения нелинейного импульса: a — от площади нагружения (S), b — от скорости нагружения (σ).

Конечные размеры нелинейного импульса и диссипации энергии, запасенной в нем, оказывают определенное влияние на характер ее взаимодействия с протяженными дефектами структуры и, в частности, со свободной поверхностью. В работах [10–12] было показано, что выход бесконечной (случай периодических граничных условий) солитонобразной волны на свободную поверхность может приводить к отрыву приповерхностных атомных плоскостей, если кинетическая энергия на фронте волны превосходит критическую величину E_c . Для меди критическая величина E_c , приходящаяся на один атом, примерно равна 2.2 eV. В случае нелинейного импульса конечных размеров пороговое значение энергии, приходящейся на один атом, на фронте распространения, необходимое для отрыва, является более высоким. Это связано с тем, что для отрыва атомам поверхности требуется разорвать большее количество межатомных связей. Следовательно, чем меньше область нагружения, тем большую долю составляют граничные атомы и, следовательно, тем выше будет значение критической энергии. В проведенных компьютерных экспериментах соотношение атомов, расположенных вдоль границы нагружения с общим количеством нагружаемых атомов, менялось в интервале от 10 до 50%. В предельном случае, когда в нелинейном импульсе, вышедшем на тыльную поверхность, все атомы будут граничными (15 атомов и менее), критическое значение энергии возрастает почти на 30%.

Таким образом, в настоящей работе впервые показано, что при высокоэнергетическом локальном нагружении в кристаллите формируются нелинейные уединенные импульсы конечного размера. Во фронте данных импульсов сохраняется высокая плотность энергии, которая может переноситься на достаточно большие глубины.

Список литературы

- [1] Holian B.L., Straub G.K. // Phys. Rev. 1978. V. 49. N 4. P. 1593–1609.
- [2] Дынин Е.А. // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19. № 1. С. 111–121.
- [3] Straub G.K., Holian B.L., Petscheck R.G. // Phys. Rev. 1979. V. B19. N 8. P. 4049–4054.
- [4] Toda M. Теория нелинейных решеток. М.: Мир, 1984.
- [5] Псахье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1–5.
- [6] Берч А.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В. // Поверхность. 1994. № 6. С. 23–31.

- [7] Ereneeov S.V., Lipnitskii A.G., Potekaev A.I., Chulkov E.V. // Physics of Low-Dimensional Structures. 1997. N 3/4. P. 127–133.
- [8] Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю. // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33. № 2. С. 143–146.
- [9] Псахье С.Г., Сараев Д.Ю., Зольников К.П. // ПЖТФ. 1996. Т. 22. В. 10. С. 6–9.
- [10] Зольников К.П., Уваров Т.Ю., Скрипняк В.А., Липницкий А.Г., Сараев Д.Ю., Псахье С.Г. // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. В. 8. С. 18–23.
- [11] Зольников К.П., Уваров Т.Ю., Липницкий А.Г., Сараев Д.Ю., Псахье С.Г. // Физика горения и взрыва. 2000. № 5. С. 126–129.
- [12] Псахье С.Г., Зольников К.П., Уваров Т.Ю. // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. В. 19. С. 6–9.