07,10 Динамическое состояние кристалла перед фронтом ударной волны

© В.В. Мохова^{1,2}, Д.А. Волков¹, А.В. Тилькунов^{1,2}, Н.И. Орлов²

¹ Российский федеральный ядерный центр —

Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики,

Саров, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",

Саровский физико-технический институт,

Саров, Россия

E-mail: vvmokhova@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 12 февраля 2015 г.)

Результаты рентгенодифракционных исследований ударно-сжатых монокристаллов указывают на разворот моноблоков на $\sim 3^{\circ}$ перед фронтом ударной волны как в области пластического течения, так и в области упругих сжатий. Зарегистрировано два динамических состояния решетки, яркость рефлексов эволюционирует во времени. Положение первого динамического рефлекса совпадает с положением рефлекса от исходной структуры. Второй рефлекс соответствует отражению от равновесно сжатой структуры. Обсуждаются возможные причины двух состояний решетки.

Импульсные рентгенодифракционные исследования позволяют наблюдать на микроскопическом уровне изменения структуры ударно-сжатых кристаллов во фронте ударной волны. По сдвигу $\Delta\theta$ дифракционного отражения от сжатой структуры относительно дифракционного пика исходной структуры с известным брэгговским углом θ_0 дифракции определяется угол θ_d дифракционного пика сжатой структуры. Межплоскостное расстояние сжатой структуры d_d определяется по уравнению Брэгга

$$n\lambda = 2d_d \sin\theta_d,\tag{1}$$

где λ — длина волны характеристического излучения, d_d — межплоскостное расстояние, θ_d — угол между лучом и отражающей плоскостью решетки, n — порядок дифракции.

Использование двух характеристических линий излучения Мо K_{α} ($\lambda = 0.71$ Å) и K_{β} ($\lambda = 0.632$ Å) и узкоугловой схемы съемки (угол облучения кристалла ~ 0.1°) позволило получить новые данные об изменениях структуры ударно-сжатых монокристаллов [1,2]. Постановка эксперимента и процедура измерений детально описаны в [1,2].

При использовании узкоугловой схемы съемки на предварительном снимке регистрируется только одно отражение для одной длины волны излучения и только для одной группы плоскостей (в зависимости от угла падения рентгеновских лучей): отражение либо линии K_{α} , либо линии K_{β} .

На динамических снимках появляются отражения пары линий K_{α} и K_{β} , и угловое расстояние между отражениями $2\Delta\theta$, как в случае поликристаллической съемки, составляет

$$2\Delta\theta = 2\theta_d - 2\theta_0. \tag{2}$$

Был сделан вывод, что в ударно-сжатом кристалле происходит разворот кристаллитов на угол ~ 3°, при котором часть кристаллитов оказывается в отражающем положении и для линии K_{α} , и для линии K_{β} [2]. Игнорирование этого явления приводит к увеличению почти вдвое значения углов Брэгга, завышению значения сжатия решетки и ошибкам в интерпретации полученных результатов [2].

Развороты моноблоков были зарегистрированы во всех исследованных ударно-сжатых монокристаллах в области давлений P = 2-50 GPa, в области пластического течения [1] и в области упругих сжатий [3].

Некоторые исследователи на динамических снимках ударно-сжатых монокристаллов [4,5] зарегистрировали отражения от двух состояний решетки. Положение одних отражений соответствовало отражению от динамически сжатой решетки, а положение других совпадало (или почти совпадало) с положениями отражений от исходной структуры.

Рентгеновские лучи с энергией ~ 17 keV проникают на глубину порядка десятков микрометров в монокристаллы фтористого лития. Поэтому, когда кристалл ударно сжат, дифракционный сигнал состоит из рентгеновских лучей, дифрагированных одновременно от плоскостей сжатого и несжатого материала.

И многие авторы отражения от "несжатой" структуры, положение которых совпадает с отражениями от исходной структуры, принимали за отражения от исходной структуры (static).

Но при узкоугловой схеме съемки и использовании двух линий характеристического излучения, когда на предварительном снимке регистрируется отражение от монокристалла только одной линии излучения, появление на динамических снимках отражений двух длин волн, положения которых совпадают с положением отражений от исходной структуры, указывает на то, что со структурой что-то произошло. И отражения, которые зарубежные авторы принимали за отражения от исходной структуры (static), в наших экспериментах были приписаны отражениям от новой, не монокристаллической структуры. Для простоты назовем ее "несжатой" структурой.

Отражения от "несжатой" структуры были зарегистрированы для различных кристаллов в широкой области давлений [1,3].

В области упругих сжатий [3] при исследовании структуры ударно-сжатых монокристаллов SiO₂ (в направлении (001)), Si, LiF (в направлении сжатия (111)), у которых давление упругого предвестника значительно ($P \sim 6.5$, 5.6, 4.2 GPa соответственно), также были зарегистрированы динамические рефлексы: положение одних почти совпадало с положением отражения от исходной структуры, положение других соответствовало одномерному (упругому) сжатию решетки [3]. Большие упругие сжатия позволили зарегистрировать значительные отклонения от исходной структуры кристалла. Появляющиеся на динамических снимках яркие отражения, положения которых совпадают с положением отражения от исходной структуры, не вызваны сжатием слабой упругой волны, распространяющейся перед фронтом ударной волны.

В работе [1] было сделано предположение, что за фронтом ударной волны реализуются два состояния структуры: равновесное (изотропно сжатая ячейка) и неравновесное, в котором примитивная ячейка представляет собой ромбоэдр с углом при вершине, не равным 60°, и положение одного из отражений совпадает с положением исходного пика. Но при одновременной регистрации [4,5] отражений от плоскостей, перпендикулярных и параллельных фронту ударной волны, это предположение не подтвердилось, не были зарегистрированы другие отражения от неравновесного состояния.

Отражения от "несжатой" структуры зарегистрированы не на всех динамических снимках, были получены динамические снимки с отражениями только от изотропно сжатой структуры. Для выяснения причин появления или исчезновения отражений от "несжатой" структуры был создан лабораторный комплекс с меньшей длительностью рентгеновского импульса (7 ns) [6].

В лабораторном комплексе в качестве генератора плоской ударной волны использовалась энергия электровзрыва фольги для разгона тонкого диэлектрического ударника, который тормозился об исследуемый образец, формируя в нем плоскую ударную волну. Использование ударников различной толщины позволило изменять скорость полета ударника: при толщине ударника 1 mm скорость полета ударника составляет ~ 2.7 km/s, а при толщине ударника 50 $\mu m - \sim 8$ km/s.

Источником генератора рентгеновского излучения служила созданная в ВНИИЭФ газоразрядная камера с плазменным фокусом с дозой на выходном окне 50 rad и



Рис. 1. Схема съемки сквозь ударник и схема нагружения монокристаллов.

длительностью рентгеновского импульса 7 пs. Использовалось характеристическое излучение молибдена (длины волн $\lambda_{K_{\alpha}} = 0.71$ Å, $\lambda_{K_{\beta}} = 0.632$ Å). Более подробное описание лабораторного комплекса приведено в [6].

Расстояние между образцом и источником рентгеновского излучения составляло $\sim 400\,\mathrm{mm}$. Система регистрации располагалась на расстоянии $\sim 350\,\mathrm{mm}$ от исследуемого образца.

Плоский образец монокристалла облучался импульсом рентгеновского излучения в схеме съемки на отражение Брэгга-Брентано. Съемка проводилась как сквозь ударник в области формирования ударной волны, так и после выхода ударной волны из кристалла в экран (оргстекло). Скорости полета диэлектрического ударника, моменты торможения ударника на образце и выхода ударной волны из образца в каждом опыте измерялись фотохронографом с применением оптоволоконной методики при регистрации вспыхивающих воздушных зазоров. Схема съемки сквозь ударник и схема нагружения монокристаллов LiF приведены на рис. 1.

На этом комплексе были получены рентгенодифракционные картины ударно сжатых монокристаллов фтористого лития и хлористого натрия в направлении сжатия [100] в различные моменты времени относительно прихода ударной волны на исследуемую поверхность в области давлений P = 2-15 GPa.

Результаты исследования показали, что в начальные моменты времени на динамических снимках были зарегистрированы яркие расширенные отражения от "несжатой" структуры, положение которых с точностью измерений совпадало с положением отражений от исходной структуры. Появление еще одной линии и изменение формы рефлексов (расширение пиков) указывали на то, что новые отражения — отражения от деформированной структуры. Со временем их яркость падала, и появлялись отражения от равновесной изотропно сжатой в σ раз решетки (решетка типа NaCl с ребром $a_d = a_0 \sigma^{-1/3}$, где a_0 — параметр исходной решетки). При сдвиге экспозиции в более поздние времена относительно фронта ударной волны в образце на



Рис. 2. Рентгенодифракционные снимки (*a*, *b*) и профили оптической плотности (*c*) монокристалла LiF. *a* — предварительный снимок, *b* — динамический.

динамическом снимке исчезали отражения от "несжатой" структуры, а регистрировались только отражения от равновесной изотропно сжатой в σ раз структуры. Время исчезновения отражений от "несжатой" структуры зависело от толщины образца и времени пробега ударной волны по образцу и изменялось в интервале $0.1-0.3\,\mu$ s.

На рис. 2 приведены типичные рентгенодифракционные снимки монокристалла LiF до и после подлета ударника из оргстекла толщиной ~ 1 mm (W = 2.9 km/s). В образце генерировалась ударная волна амплитудой 13.9 GPa, величина сжатия в образце $\sigma = 1.16$. При изотропном сжатии решетки в $\sigma = 1.16$ раз $\sigma^{1/3} = 1.05$, $a_d = 3.83$ Å, $d_{200} = 1.915$ Å, $\theta_{a_{200}} = 10.68^\circ$, $\theta_{\beta_{200}} = 9.5^\circ$.

На предварительном снимке (рис. 2, *a*) рентгеновский луч располагался под углом $\sim 10^\circ$ к кристаллу, что соответствует брэгговскому углу $\theta_a = 10.16^\circ$ отражения от плоскостей (200) ($d_{200} = 2.0125$ Å) для излучения K_a .

На динамическом снимке (рис. 2, b) зарегистрированы два ярких отражения: отражение $(200)K_{\alpha}$ и отражение

 $(200)K_{\beta}$, положение которого близко к положению отражения $(200)K_{\alpha}$ исходной структуры (рис. 2, *c*). Структура еще не сжата, но уже дефектна.

Авторы [7] при измерении межплоскостного расстояния ударно-сжатого монокристалла хлористого натрия также регистрировали отражение от "несжатой" структуры в течение ~ 500 ns, и только после этого появлялось отражение от сжатой структуры. При этом положение отражения от "несжатой" структуры слегка не совпадало с положением отражения от исходной структуры.

Другими авторами при исследовании кремния [4,5], ударно-сжатого с помощью лазерной генерации ударных волн, при использовании широкоугловой схемы съемки (расстояние от источника до образца — 1.3 mm) зарегистрировано более яркое, чем исходное, отражение, положение которого почти совпадает с отражением от исходной структуры. Отражение появляется до фронта сжатия и исчезает через ~ 2 ns (до выхода волны сжатия на свободную поверхность). На основе данных работы [5], зная толщину образца, можно даже оценить скорость распространения этого состояния.

На основании экспериментов был сделан вывод, что динамическое состояние "несжатой" дефектной структуры появляется раньше волны сжатия (во всяком случае равновесного состояния структуры). Перед ударным фронтом происходит разворот кристаллов.

Возможная причина существования "несжатого" дефектного состояния до фронта сжатия — выброс частиц или краудион [8], распространяющийся на большие расстояния перед фронтом сжатия, искажающий исходную кристаллическую структуру и даже увеличивающий межплоскостное расстояние (часто регистрируемый результат). Смещенный ряд атомов может быть дополнительным центром генерации дислокаций. Подобные изменения структуры могут возникать и под воздействием солитонов, распространяющихся перед фронтом ударной волны [9].

В настоящее время истиные причины появления состояний "несжатой" дефектной структуры перед фронтом ударной волны неизвестны, но методики, работающие в режиме реального времени, очень скоро позволят прояснить природу этих состояний.

Авторы выражают благодарность исследователю и создателю методики импульсных рентгенодифракционных исследований ударно-сжатых кристаллов Л.А. Егорову, а также Н.Г. Макееву и В.Г. Румянцеву за вклад, который они внесли в развитие этой методики.

Список литературы

- Л.А. Егоров, А.И. Баренбойм, Н.Г. Макеев, В.В. Мохова, В.Г. Румянцев. ЖЭТФ 103, 1, 135 (1993).
- [2] В.В. Мохова, Д.А. Волков, А.В. Тилькунов, Н.И. Орлов. ФТТ 57, 4, 775 (2015).

- [3] Л.А. Егоров, А.И. Баренбойм, В.В. Мохова, А.И. Самойлов. Хим. физика 14, 2–3, 100 (1995).
- [4] A. Loveridge-Smith, A. Allen, J. Belak, T. Boehly, A. Hauer, B. Holian, D. Kalantar, G. Kyrala, R.W. Lee, P. Lomdahl, M.A. Meyers, D. Paisley, S. Pollaine, B. Remington, D.C. Swift, S. Weber, J.S. Wark. Phys. Rev. Lett. 86, 2349 (2001).
- [5] D.H. Kalantar, A.M. Allen, F. Gregori, B. Kad, M. Kumar, K.T. Lorenz, A. Loveridge, M.A. Meyers, S. Pollaine, B.A. Remington, J.S. Wark. In: AIP Conf. Proc. "Shock compression of condensed matter" / Eds M.D. Furnish, N.N. Tradhani, Y. Horie. Atlanta, Georgia (2001). P. 615.
- [6] В.В. Мохова, Л.А. Егоров, И.Н. Говорунов, В.В. Маслов, А.П. Фалин, К.В. Морозов, Д.А. Волков, А.В. Рыжков, С.Е. Елфимов, А.В. Тилькунов, С.В. Шулимов. ПТЭ 6, 94 (2010).
- [7] F. Muller, E. Schulte. Z. Naturforch. 33a, 918 (1978).
- [8] Ю.И. Головин, А.И. Тюрин. ФТТ 42, 10, 1818 (2000).
- [9] T.C. Germann, B.L. Holian, P.S. Lomdahl. Phys. Rev. Lett. 84, 23, 5351 (2000).