

О. І. Малий, А.О. Ковальчук

Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького
Бульв. Шевченка, 81, 18000 м. Черкаси
maliyolexandr@ukr.net

БАЛІСТИЧНІ СТИБКИ В УМОВАХ УДАРНОГО НАВАНТАЖЕННЯ

В роботі представлено тривимірну модель ударної хвилі в ГЦК решітці, яку застосовано до пояснення балістичного члена у частоті стрибків міжвузельного атома при дії ударних навантажень. У роботі встановлено утворення стимульованого краудіона у напрямку поширення ударної хвилі і здійснено порівняння результатів при використанні парного та багаточастинкового потенціалу.

В работе представлена трёхмерная модель ударной волны в ГЦК решётке, которая была применена для объяснения баллистического члена в частоте прыжков междоузельного атома при ударном воздействии. В работе установлено возникновение стимулированного краудiona в направлении движения ударной волны и проведено сопоставление результатов при различных потенциалах взаимодействия.

A three-dimensional model of shock wave in FCC lattice is presented. It was applied to the explanation of the ballistic term in the jump frequency of point defect under pulse loading. Formation of dynamic crowdion was found. It moves in the direction of the wave front propagation. The comparison of the results for different interaction potentials is made.

Ключові слова: Молекулярна динаміка, балістичні стрибки, ударне навантаження, багаточастинковий потенціал, міжвузловий атом, ударна хвиля, краудіон.

Вступ. В експериментах з дослідження дифузії [1] у металах під дією імпульсних навантажень часто спостерігається формування метастабільних сплавів із межами розчинності, що набагато перевищують рівноважні значення. Для теоретичного опису формування у дифузійній парі метастабільних твердих розчинів при імпульсному навантаженні раніше були запропоновані мікроскопічні моделі, що базувались на концепції «балістичних стрибків» [2] (сама концепція «балістичних стрибків» була висунута Мартеном, яку він успішно застосував для дослідження радіаційно-стимульованої дифузії [3]). Вони були враховані шляхом доповнення закону Ареніуса балістичним членом b :

$$\Gamma = \nu \exp\left(\frac{-\sigma_a}{kT}\right) + b \quad (1)$$

Γ - частота дифузійних актів, ν - стандартний частотний фактор, σ_a - активаційний бар'єр дифузійного стрибка, b - член, який визначає вклад балістичних (нетермічних) актів і співвідноситься із інтенсивністю імпульсної дії (зокрема, при швидкій імпульсній деформації приймається пропорційним $\dot{\epsilon}^2$). Конкретний вигляд b може залежати від моделі теоретичного розгляду, але на відміну від випадку радіаційно-стимульованої дифузії, природа балістичного

члена у даному явищі не з'ясована.

Але перш ніж переходити до безпосереднього дослідження поведінки точкових дефектів під дією імпульсних навантажень, розглянемо їх статичні положення, на яких відпрацюємо різні молекулярно динамічні потенціали. Це дасть нам підстави (необхідну, але не достатню умову) судити про адекватність результатів, отриманих у різних моделях, та ступінь їх відповідності реальній ситуації.

Дослідження стійких положень точкових дефектів. Для дослідження стійких положень було використано алгоритми молекулярної статистики, які ґрунтуються на мінімізації потенціальної енергії кристалу. Для порівняння результатів використовувалися два потенціали: парний потенціал Борна – Майєра та багаточастинковий потенціал Джонсона.

Потенціал Борна – Майєра задається наступним рівнянням:

$$\Phi(r) = A \exp\left(\alpha\left(1 - \frac{r}{r_0}\right)\right). \quad (1)$$

Він дає правильне рівняння стану при проходженні ударної хвилі для міді при параметрах $A = 0.05$ еВ, $r_0 = 2.55$ Å – радіус першої координаційної сфери для міді, $\alpha = 13.9$ [4].

На відміну від парних потенціалів, енергія кристалу при застосуванні багаточастинкових потенціалів має дві складові:

$$E = \sum_{i=1}^N (F_i(\rho) + \Phi_i), \quad (2)$$

де F_i – енергія, зумовлена впливом електронного газу; Φ_i – енергія, зумовлена парною взаємодією, сума береться по всіх атомах системи.

У даній роботі було використано потенціал Джонсона [5]. Математичний запис даного потенціалу заводиться до наступних рівнянь:

$$\Phi_i = \frac{1}{2} \sum_i^N \phi(r_{ij}); \quad (3)$$

тут $\phi(r_{ij})$ – енергія парної взаємодії між i -тим та j -тим атомами, яка записується у формі

$$\phi(r) = \phi_e \exp\left[-\gamma\left[\frac{r}{r_e} - 1\right]\right], \quad (4)$$

де r_e – радіус першої координаційної сфери (рівноважна відстань найближчих сусідів); ϕ_e визначається з формули:

$$\phi_e = \frac{5\Omega G}{2\gamma(\gamma - \beta)} \quad (5)$$

Ω – атомний об'єм, G – модуль зсуву. Енергія, зумовлена впливом електронного газу визначається із співвідношення:

$$F(\rho) = -E_c \left[1 - \frac{\alpha}{\beta} \ln\left[\frac{\rho}{\rho_e}\right] \right] \cdot \left[\frac{\rho}{\rho_e} \right]^{\frac{\alpha}{\beta}} - \Phi_e \left[\frac{\rho}{\rho_e} \right]^{\frac{\gamma}{\beta}}, \quad (6)$$

де E_c – енергія зв'язку; індексом «e» позначено рівноважні параметри ідеального кристалу, а параметр α обчислюється з формули:

$$\alpha = \sqrt{\frac{3B\Omega}{E_c}} \quad (7)$$

B – модуль об'ємної деформації. Густина електронного газу:

$$\rho_i = \sum_i^N f(r_{ij}) \quad (8)$$

$$f(r) = f_e \exp\left[-\beta\left[\frac{r}{r_e} - 1\right]\right] \quad (9)$$

$f_e, \beta, \alpha, \gamma$ – підібрані параметри.

Шляхом диференціювання (2) по r_i при підстановках (3-9) отримуємо вираз для сили, яка діє на i -тий атом:

$$\vec{F}_i = -\nabla_{r_i} E = -\nabla_{r_i} (F_i(\rho_i) + \sum_{i \neq j}^N F_j(\rho_j) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \phi_{ij}(r_{ij})) =$$

$$-\sum_{i \neq j}^N \left[\frac{\partial F_i(\rho)}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_i} \frac{\partial f_i(r)}{\partial r} \Big|_{r=r_{ij}} + \frac{\partial F_i(\rho)}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_j} \frac{\partial f_i(r)}{\partial r} \Big|_{r=r_{ij}} + \frac{1}{2} \frac{\partial \phi_i(r)}{\partial r} \Big|_{r=r_{ij}} \right] \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{r_{ij}} \quad (10)$$

Положення моделі

1. Система знаходиться при сталому об'ємі.
2. На систему накладаються періодичні граничні умови.
3. Сили взаємодії атомів визначаються за допомогою потенціалу

Джонсона (3-10) або Борна – Майєра (1).

Алгоритм молекулярної статистики з використанням потенціалу Джонсона.

1. Ініціалізація початкових умов.
2. Обчислення електронної густини ρ навколо кожного з атомів і визначення електронної функції $F(\rho)$.
3. Визначення частинних похідних від функцій $F(\rho)$, $f(r)$, $\phi(r)$.
4. Визначення проєкцій сили Fx_i, Fy_i, Fz_i та її модуля F_i .
5. Визначення максимальної сили $F \max$ серед усіх сил, що діють на атоми в системі.
6. Зміщення кожного атома системи за наступним законом:

$$x_i = x_i + \frac{Fx_i dt^2}{2m}$$

$$y_i = y_i + \frac{Fy_i dt^2}{2m} \quad (10)$$

$$z_i = z_i + \frac{Fz_i dt^2}{2m}$$

7. Якщо максимальна сила більша за деяке значення $F_{critical}$, то повертаємося до кроку 2, інакше завершуємо процедуру обчислення.

На основі описаного алгоритму було отримано конфігурації точкового дефекту та його сусідів при використанні парного і багаточастинкового потенціалів. Вони практично не відрізняються в обох випадках і представлені на рис. 1.

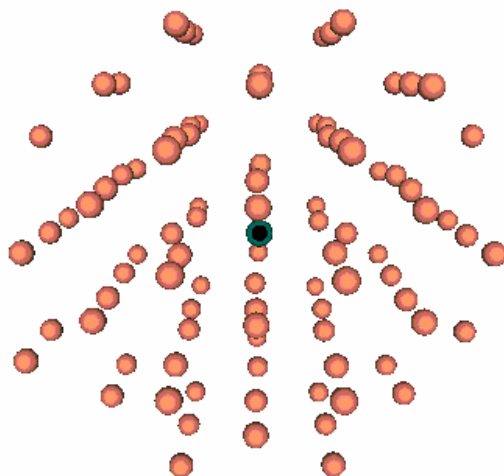


Рис1. Стійке положення міжвузлового атома в ГЦК решітці міді

Критерієм кількісного порівняння конфігурації системи була вибрана кореляційна функція $N(r)$, визначена як кількість атомів, що потрапляють до сферичного прошарку радіуса r і товщиною dr (в нашому випадку величина dr не суттєва, оскільки при абсолютному нулі температури усі атоми відповідної координативної сфери знаходяться строго на однакових відстанях)

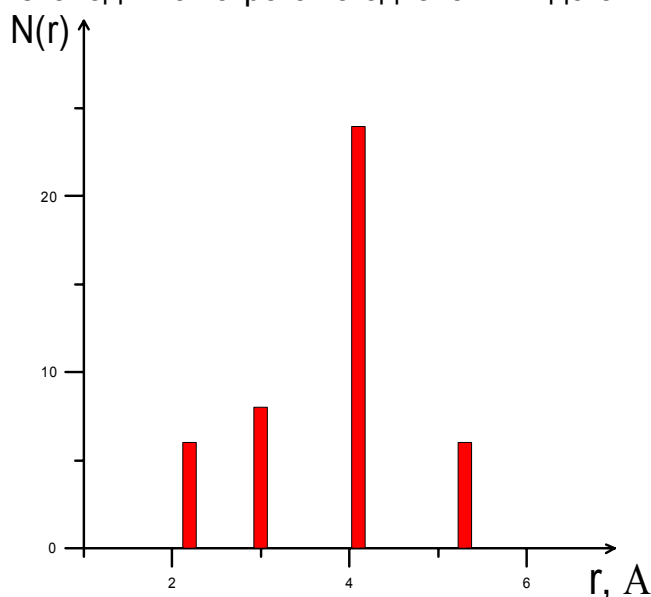


Рис 2. Кореляційна функція, побудована навколо точкового дефекту для потенціалу Джонсона і потенціалу Борна – Майєра

Порівняння кореляційних функцій, отриманих у моделях парного та багаточастинкового потенціалу не виявляє практично ніяких розбіжностей у межах похибки заокруглень (рис. 2), що дає підставу застосовувати потенціал Борна – Майєра для вивчення стійких конфігурацій. Значення енергії (різниця потенціальної енергії системи у відрелаксованому стані, що містить міжвузлілля, та без нього) точкового дефекту була приблизно однакова і становила для багаточастинкового потенціалу 6,44 eV, а для парного потенціалу 6,56 eV (розбіжність становить 1,83%).

Дія ударної хвилі на міжвузловий атом. Здебільшого ударні навантаження призводять до утворення ударних хвиль у матеріалах. За

звичайних умов концентрація міжвузлових атомів у системі на порядки менша за концентрацію вакансій, але ударні навантаження можуть призвести до індукування нерівноважних дефектів. Як відомо, рухливість міжвузлових атомів значно більша за рухливість вакансій, тому вони можуть призводити до суттєвого пришвидшення дифузії при збільшенні їх кількості. Проте, для утворення метастабільних сплавів необхідні умови, за яких дифузійні стрибки відхиляються від закону Ареніуса, який забезпечує рівноважний розподіл Больцмана. Тому виникає питання про те, яким чином динамічна дія на кристал може спричинити таку нерівноважну поведінку точкових дефектів. Виходячи з цих міркувань була створена молекулярно динамічна модель ударної хвилі.

Положення моделі:

1. Однокомпонентна система (мідь).
2. Система знаходиться в початковий момент при абсолютному нулі температури (відсутні теплові коливання атомів системи)
3. У системі впроваджено точковий дефект (міжвузловий атом) в октаедричному міжвузлі.
4. Ударна хвиля задається рухом перших двох площин з фіксованою швидкістю v у напрямку нормальному до сімейства площин $\{100\}$
5. Вздовж напрямку проходження ударної хвилі фіксується координата останніх двох атомних площин.
6. У напрямку, перпендикулярному до поширення хвилі, накладено періодичні граничні умови.
7. Взаємодія між атомами визначається за допомогою потенціалу Джонсона, або Борна – Майєра.
8. Поточне положення фронту хвилі визначається з співвідношення:

$$\left(v_i - \frac{v}{2}\right)\left(v_{i-1} - \frac{v}{2}\right) < 0 \quad (11)$$

тут v_i, v_{i-1} – усереднена проекція швидкості i -тої та $i-1$ -шої атомної площин на напрям поширення ударної хвилі відповідно, v – швидкість удару (на основі наближення 2, фронт ударної хвилі не є розмазаним в просторі і може визначатися через дві сусідні площини).

При моделюванні ударної хвилі за допомогою парного потенціалу (потенціалу Борна – Майєра) спостерігалось захоплення точкового дефекту ударною хвилею і його переміщення вздовж напрямку удару. Під положенням дефекту ми тут розуміємо миттєве положення «зайвого» атома, який у різні моменти часу, зрозуміло, представлений різними атомами системи (тобто, говорячи про рух дефекту, ми маємо на увазі зміщення геометричного місця, а не конкретного атома). При цьому утворювався стимульований краудіон, нестійкий у ненавантаженому стані, оскільки для ГЦК решітки за відсутності динамічних впливів стійким є краудіон лише у кристалографічному напрямку $[110]$ [6], тоді як у нашому випадку спостерігається його утворення у напрямку руху хвилі (тобто $[100]$). Аналогічно до парного потенціалу, при застосуванні багаточастинкового потенціалу міжвузловий атом переміщувався на відстань порядку міжатомної, витісняючи при цьому новий атом у міжвузлілля, здійснюючи цим kick-out (ми це називаємо стимульованим краудіоном).

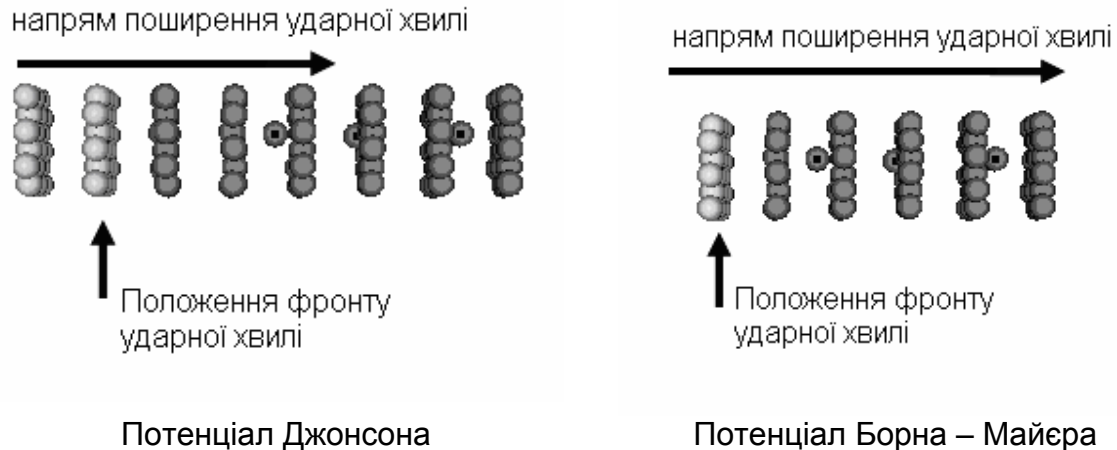


Рис 3. Стимульований краудіон. Масштаб у напрямку розповсюдження ударної хвилі непропорційно збільшено для наочності

Як бачимо, результати моделювання у випадку різних потенціалів взаємодії є подібними. Єдиною принциповою різницею в даному випадку є положення фронту хвилі по відношенню до стимульованого краудіона. При застосуванні багаточастинкового потенціалу фронт хвилі знаходиться на більшій відстані до краудіона, ніж при моделюванні парним потенціалом. Ця різниця зберігається практично на всьому проміжку моделювання. Зрозуміло, що при такій послідовності вибивань (kick-out) частота елементарних дифузійних актів є функцією швидкості удару (зокрема, при досить малих швидкостях даний ефект взагалі не буде спостерігатися) і зовсім не залежить від термічних флуктуацій. Тому закон Ареніуса для даного процесу не є справедливим, що і може бути поясненням виникнення балістичного члена, оскільки, на нашу думку, частоти, зумовлені рухом хвилі і термічними флуктуаціями, є адитивними.

Подяки. Робота частково підтримана Державним фондом фундаментальних досліджень України № Ф25.4/162 за договором Ф25/133-2008 „Фазоутворення в умовах швидкісної пластичної деформації і струму” від 14.05.2008.

1. Мазанко В.Ф., Покоєв А.В., Миронов В.М. и др. Диффузионные процессы в металлах под действием магнитных полей и импульсных деформаций – М.: «Машиностроение-1»; Самара: «Самарский университет», 2006 – тт. 1-2
2. А.О.Koval'chuk, D.S.Gertzricken, А.М.Gusak, V.F.Mazanko Defect and Diffusion Forum Vol. 277 (2008), pp. 69-74
3. G. Martin: Phys. Rev. B Vol. 30 (1984), p. 1424
4. Запорожець Т.В., Гусак А.М. Дослідження поведінки точкових дефектів під дією ударної хвилі методом молекулярної динаміки.// Український фізичний журнал, 1998, т.43, No.10, с.1282-1289.
5. Jonson R.A. Alloy models with embedded atom method // Phys. Rev. – 1980. – V. 39, №17. – P. 554-559
6. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. М., 1975

Одержано редакцією 7.10.2008
 Прийнято до публікації 15.10.2008