

## ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МЕДИ ЗА ФРОНТОМ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

А.В. Болеста, В.М. Фомин

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича  
Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия*

**Физическая модель.** Вопрос влияния структурного состояния поликристаллических металлов и сплавов на их термомеханические свойства является чрезвычайно важным в применении к задаче создания новых нанокристаллических высокотвердых материалов и определения их упругих модулей, предела текучести и ударной адиабаты.

Моделирование проводилось методом молекулярной динамики (МД). Взаимодействие атомов меди рассчитывалось в рамках метода внедренного атома [1]. Расчет траекторий движения проводился с помощью параллельного молекулярно-динамического пакета LAMMPS [2]. Для формирования начальных данных атомы размещались в расчетной ячейке в соответствии с гранецентрированной кубической решеткой. Затем полученная система разогревалась выше точки плавления, поддерживая давление равным атмосферному. Полученный расплав резко охлаждался при атмосферном давлении до температуры от 400 до 1200 К, после чего в процессе эволюции системы при постоянной температуре в ней происходит гомогенная нуклеация кристаллитов меди, которые растут в течение нескольких десятков наносекунд, формируя поликристалл. Затем для остановки роста зерен система охлаждалась до комнатной температуры 300 К. Различные режимы нуклеации и роста зерен приводят к формированию поликристаллического состояния с различной величиной среднего размера зерна. Так как в алюминии нуклеация идет существенно дольше, рассчитанные поликристаллические конфигурации для меди использовались как базисные для получения поликристаллического состояния для алюминия путем релаксации к заданным давлению и температуре. Для выявления локального структурного состояния системы атомов, наряду с классической парной функцией радиального распределения, применялся анализ по ближайшим соседям [3], позволяющий выявлять атомы с локальной координацией, соответствующей гранецентрированной кубической (ГЦК), гексагональной плотноупакованной (ГПУ) и объемно-центрированной кубической (ОЦК) кристаллическим решеткам и неупорядоченной фазе. Для вычисления среднего размера зерна в системе вводилось понятие ГЦК+ГПУ кластера – множества всех связанных атомов с ГЦК и ГПУ локальной координацией. Понятие двух связанных атомов вводилось как условие того, что расстояние между ними в заданный момент времени меньше определенного, вычисляемого как первый минимум в парной функции радиального распределения. В результате выявления всех, определенных таким образом, ГЦК+ГПУ кластеров, было рассчитано среднее количество атомов, им принадлежащих, и их средний диаметр  $d$  исходя из предположения о сферической форме кластеров, что в общем случае верно только с некоторой точностью. В связи с тем, что алгоритм анализа по ближайшим соседям [3] с ростом температуры в силу роста флуктуаций межатомных расстояний может для некоторых атомов, находящихся в упорядоченной фазе, выдавать неправильную координацию, чаще всего относя их к неупорядоченной фазе, в работе дополнительно использовался расчет структурного фактора  $S(k)$  [4].

Моделирование ударно-волнового нагружения материала производилось путем введения в систему ударника, движущегося с постоянной заданной скоростью. В такой по-

становке задачи время наблюдения за состоянием вещества за фронтом ударной волны ограничено временем распространения ударной волны по расчетной ячейке, что составляет всего несколько десятков пикосекунд. Поэтому для выявления более длительной динамики эволюции структурного состояния вещества за фронтом также применялся алгоритм гюгониостата [5].

**Структурное состояние за фронтом ударной волны и диаграмма состояния.** Первый вопрос, который возникает в связи с анализом структурного состояния за фронтом волны, это при каком давлении во фронте материал расплавится. Полное плавление меди за фронтом регистрировалось с помощью построения структурного фактора и происходило при  $P_x = 220 - 230$  ГПа, что совпадает с полученными ранее результатами экспериментальных и МД исследований [6]. Поликристалл с самым малым размером зерна 2 нм плавится несколько раньше при давлении 205 ГПа, что согласуется с данными по зависимости температуры на ударной адиабате от размера зерна, описанными в предыдущем разделе. Но если проследить за эволюцией структуры ударно-сжатого материала при значительно меньших давлениях (от 100 ГПа), то можно увидеть, что и в данном случае сразу за фронтом волны большая часть атомов также теряет локальную координацию, связанную с какой-либо кристаллической структурой. Ранее этот эффект в работе [7] был назван виртуальным плавлением. Механизм данного разрушения кристаллической структуры связан с тем, что в силу негидростатического характера нагружения в объеме за фронтом ударной волны возникают большие касательные напряжения, связанные с девиаторной частью тензора напряжения. В процессе сжатия касательное напряжение достигает максимума от 3 до 4 ГПа, в зависимости от давления за фронтом, а затем происходит его резкое падение, сопровождающееся значительным уменьшением количества атомов, обладающих кристаллической координацией. При этом большая часть этих атомов (> 95 %) находится уже в локальной координации, соответствующей ОЦК решетке и затем их количество медленно растет. Проследить эволюцию внутренней структуры ударно-сжатого материала удобнее всего при давлении  $P_x = 200$  ГПа, лишь немного меньшем, чем давление полного плавления меди за фронтом. В данном случае температура максимальна, но полное плавление за фронтом еще не происходит. В результате уже за время 0.3 нс все атомы с ОЦК координацией собираются в объем, форма которого близка к цилиндрической. Факт того, что атомная структура в этой цилиндрической области обладает ОЦК решеткой, подтверждается также вычислением структурного фактора (рис.1). Три максимума на рис.1 являются (110), (200) и (211) рефлексами для ОЦК кристалла с параметром решетки 0.25 нм. Расчеты структурного фактора и коэффициента диффузии отдельно внутри и вне цилиндра показывают, что вне цилиндра атомы неупорядочены (рис.1) и коэффициент диффузии примерно в 100 раз выше. Это позволяет заключить, что вне цилиндра находится жидкая фаза, с которой сосуществует твердая ОЦК фаза. Граница раздела между ними в процессе эволюции приняла цилиндрическую форму с осью цилиндра, направленной вдоль направления, в котором происходило сжатие, что вызвано необходимостью минимизации межфазной границы. Для подтверждения того, что факт образования ОЦК меди в ударно-сжатом состоянии не связан с особенностями применения к системе атомов алгоритма гюгониостата, были проведены прямые расчеты распространения ударной волны, возбуждаемой с помощью ударника. Несмотря на то, что время прохождения ударной волны по расчетной ячейке слева направо составляло около 7 пс, отчетливо можно было наблюдать зарождение и рост ОЦК кластеров за фронтом.

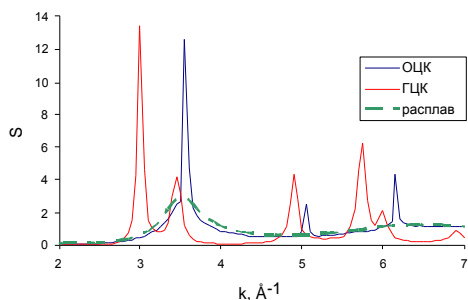


Рис. 1 Структурный фактор, рассчитанный для состояния, в котором за фронтом ударной волны давлением 200 ГПа в поликристаллической меди сосуществуют ОЦК фаза меди и расплав. Также приведен структурный фактор ГЦК структуры начального недеформированного поликристалла.

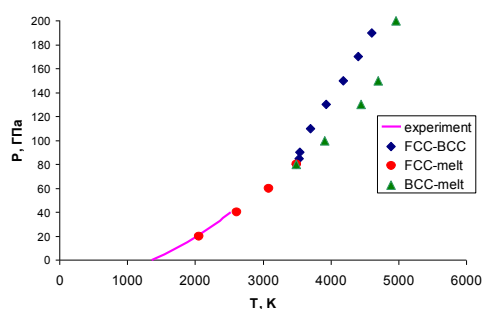


Рис.2 Фазовая диаграмма меди, полученная в результате молекулярно-динамических расчетов.

Тот факт, что в МД расчетах при давлении большем 100 ГПа и температуре большей 2000 К стабильной оказывается именно ОЦК, а не ГЦК фаза не был ранее отмечен в литературе, хотя в работах [6,7] расчеты также проводились в близком к полному плавлению режиме распространения ударной волны и с использованием того же потенциала межатомного взаимодействия [1]. Возможно это вызвано применением в [6,7] для распознавания полученного фазового состояния только парной корреляционной функции и параметра центросимметрии, что недостаточно для полноценного структурного анализа при столь высоких температурах. Также стоит отметить, что при низких температурах стабильной будет именно ГЦК структура вплоть до самых высоких давлений, что подтверждается проведенным в настоящей работе сравнением энергий ГЦК и ОЦК решеток при нулевой температуре. Энергия ГЦК решетки меньше вплоть до давления 300 ГПа. Фазовая диаграмма меди строилась методом сосуществования фаз. Фазовый переход происходит вследствие того, что энтропия ОЦК фазы больше (рис.2). Положение тройной точки на фазовой диаграмме (рис.2) позволяет рассчитать эту разность энтропий в расчете на один атом:

$$\Delta s = s_{\text{ОЦК}} - s_{\text{ГЦК}} = 0.12 k_B,$$

где  $k_B$  - постоянная Больцмана.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D.** Papaconstantopoulos D. A. et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. B, 2001, V.63, № 22, P. 224106.
2. **Plimpton S.J.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys, 1995, V.117, № 1, P. 1-19.
3. **Tsuzuki H., Brancicio P.S., Rino J.P.** Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood // Comput. Phys. Comm., 2007, V.177, № 6, P. 518-523.
4. **Болеста А.В., Головнев И.Ф., Фомин В.М.** Плавление на контакте при соударении кластера никеля с жесткой стенкой // Физическая Мезомеханика, 2001, Т.4, N.1, С.5-10.
5. **Ravelo R., Holian B.L., Germann T.C., Lomdahl P.S.** Constant-stress Hugoniot method for following the dynamical evolution of shocked matter // Phys. Rev. B, 2004, V.70, № 1, P. 014103.
6. **Bringa E.M., Cazamias J.U., Erhart P., Stölken J., Tanushev N., Wirth B.D., Rudd R.E., Caturla M.J.** Atomistic shock Hugoniot simulation of single-crystal copper // J. Appl. Phys., 2004, V.96, № 7, P. 3793-3799.
7. **Levitas V.I., Ravelo R.** Virtual melting as a new mechanism of stress relaxation under high strain rate loading // PNAS, 2012, V.109, № 33, P. 13204-13207.