

# МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ

*А. С. Буркацкий<sup>1</sup>, Ю. Б. Кудасов<sup>1,2</sup>, Д. А. Маслов<sup>1,2</sup>, В. Н. Павлов<sup>2</sup>, О. М. Сурдин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>СарФТИ НИЯУ МИФИ, г. Саров Нижегородской обл.  
<sup>2</sup>ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

## Введение

Для анализа ударно-волновых явлений часто используется гидродинамическое приближение, которое весьма точно характеризует поведение вещества в ударных волнах (УВ) высокой интенсивности, когда развиваемые давления чрезмерно превышают предел текучести материала. Но с ослаблением ударной нагрузки упругопластические свойства играют большую роль. При движении ударной волны происходит упругопластическое деформирование твердого тела. При напряжениях до предела текучести материала, вещество упруго сжимается, при больших напряжениях начинается пластическая область. Из-за разницы продольных сжимаемостей (и звуковых скоростей) в упругом диапазоне напряжений и пластическом могут выделяться упругие предвестники, в которых может быть реализовано упругое одноосное сжатие твердого тела [1].

Важной фундаментальной задачей является изучение строения фронта стационарной ударной волны в кристаллическом теле. Изучение проблемы возможно в рамках методов молекулярной динамики, однако, этот подход является ресурсозатратным. На примере модели классических частиц в кристалле алюминия с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой рассматривается альтернативная методика расчета структуры фронта стационарной ударной волны, сопровождающейся упругим одноосным сжатием вещества.

Предполагается, что разработанный в данной работе подход к определению структуры фронта ударной волны будет в дальнейшем использован для расчетов в реальных кристаллах посредством программного пакета квантово-механических вычислений Quantum ESPRESSO (QE). Решение подобной задачи позволило бы определить распределение электронной плотности и структуру электрических полей вблизи фронта ударной волны (ФУВ), а также исследовать устойчивость структуры вещества за ФУВ (упругого предвестника) и определить динамический предел текучести.

## Одномерный кристалл и ударная адиабата

Рассмотрим одномерный кристалл как цепочку одинаковых частиц, расположенных равноудаленно друг от друга вдоль прямой. Ограничимся только

продольными перемещениями частиц. Вначале предположим, что взаимодействие имеет место только между ближайшими соседями. Потенциал взаимодействия между частицами выберем в форме Леннарда-Джонса (рис. 1)

$$U = \frac{U_0}{n-m} \cdot \left( \frac{n \cdot a^m}{r^m} - \frac{m \cdot a^n}{r^n} \right), \quad (1)$$

где  $U_0$  – потенциал взаимодействия в равновесном положении (глубина потенциальной ямы, взятая со знаком минус),  $m, n$  – параметры потенциала, характеризующие силы притяжения и отталкивания между двумя соседними частицами,  $r$  – расстояние между частицами,  $a$  – равновесное расстояние между частицами.

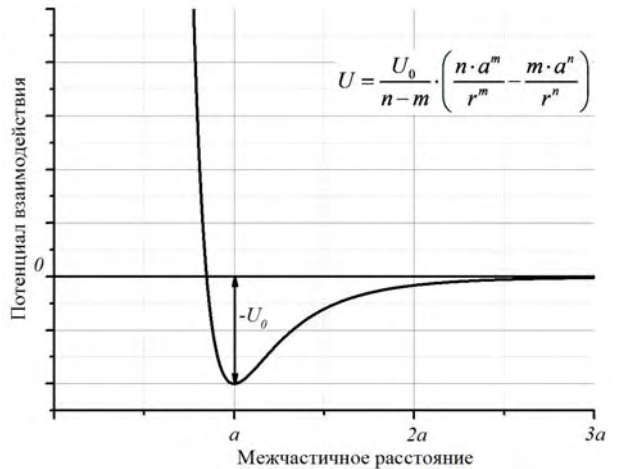


Рис. 1. Характерный вид потенциала Леннарда-Джонса

Сила взаимодействия двух соседних частиц определяется через производную потенциала и всегда ориентирована так, чтобы установить равновесное расстояние между частицами

$$F(r) = -\frac{dU}{dr} = \frac{m \cdot n \cdot U_0}{n-m} \left( \frac{a^m}{r^{m+1}} - \frac{a^n}{r^{n+1}} \right). \quad (2)$$

Скорость звука в кристалле в невозмущенном состоянии равна

$$c = \sqrt{\frac{dF(\tau)}{d\tau}} \Big|_{\tau=\tau_0=M/a^{-1}} = \sqrt{\frac{m \cdot n \cdot U_0}{M}}, \quad (3)$$

где  $\tau = M/r$  и  $\tau_0 = M/a$  – массовые линейные плотности кристалла в произвольном и равновесном состоянии соответственно,  $M$  – масса частицы.

Для получения формулы ударной адиабаты в одномерном кристалле выпишем законы сохранения массы и импульса при прохождении вещества через ФУВ

$$\tau_0 \cdot D = \tau(D - u), \quad (4)$$

$$\tau_0 \cdot D \cdot u = F - F_0, \quad (5)$$

где  $D$  – скорость ФУВ,  $u$  – скорость вещества за поверхностью разрыва,  $F$  и  $F_0 = 0$  – силы парного взаимодействия за и перед поверхностью разрыва. При рассмотрении распространения УВ по ненапряжённому кристаллу  $F_0 = 0$ .

Нормируем плотность вещества за ФУВ на плотность вещества до поверхности разрыва, скорости – на скорость звука в кристалле в невозмущенном состоянии, а силы – на  $\tau_0 \cdot c^2$ .

$$d = t(d - v), \quad (6)$$

$$d \cdot v = f, \quad (7)$$

где  $t = \tau/\tau_0$  – безразмерная массовая линейная плотность кристалла,  $d = D/c$  – безразмерная скорость фронта ударной волны,  $v = u/c$  – безразмерная скорость вещества за ФУВ,  $f = F/\tau_0 c^2$  – безразмерная сила парного взаимодействия, действующая между частицами за ФУВ.

С учётом выражений

$$F(\tau) = F(r) \Big|_{r=M/\tau} = \frac{m \cdot n \cdot U_0}{n - m} \left( \frac{a^m \cdot \tau^{m+1}}{M^{m+1}} - \frac{a^n \cdot \tau^{n+1}}{M^{n+1}} \right), \quad (8)$$

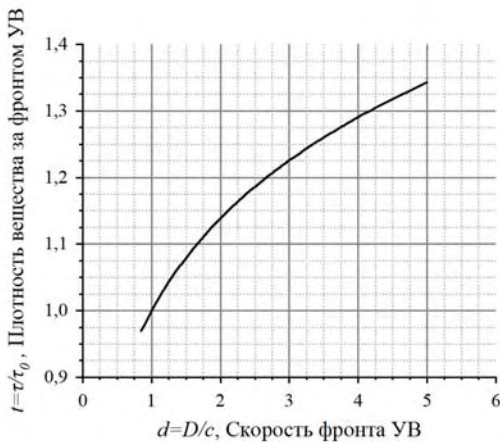
$$F(t) = F(\tau) \Big|_{\tau=\tau_0 \cdot t=(M/a)t} = \frac{m \cdot n \cdot U_0}{a(n - m)} (t^{m+1} - t^{n+1}), \quad (9)$$

$$f(t) = \frac{F(t)}{\tau_0 \cdot c^2} = (t^{m+1} - t^{n+1}) / (m - n) \quad (10)$$

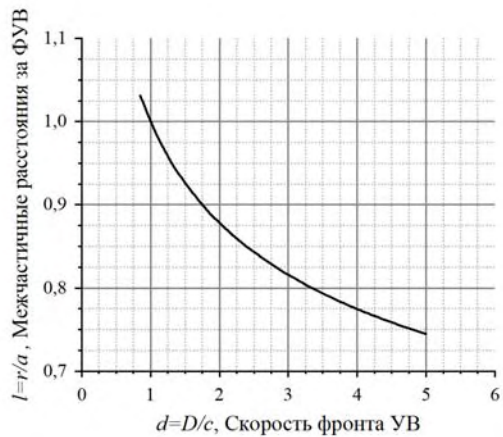
получаем систему трёх уравнений для нахождения параметров вещества за ФУВ в зависимости от безразмерной скорости УВ.

$$\begin{cases} d = t(d - v), \\ d v = f(t), \\ f(t) = (t^{m+1} - t^{n+1}) / (m - n). \end{cases} \quad (11)$$

Численное решение системы (11) позволяет построить графики зависимостей  $t(d)$ ,  $l(d)$ ,  $v(d)$ ,  $f(d)$  – рис. 2–3. Отметим отдельно, что система имеет математическое решение в области  $d < 1$ , которое, однако, не имеет физического смысла, т. к. скорость ФУВ здесь меньше скорости звука. Поэтому для этой области получены отрицательная скорость вещества и растяжение кристалла за ФУВ.

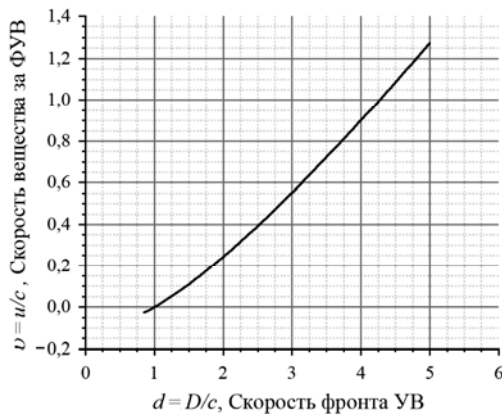


а

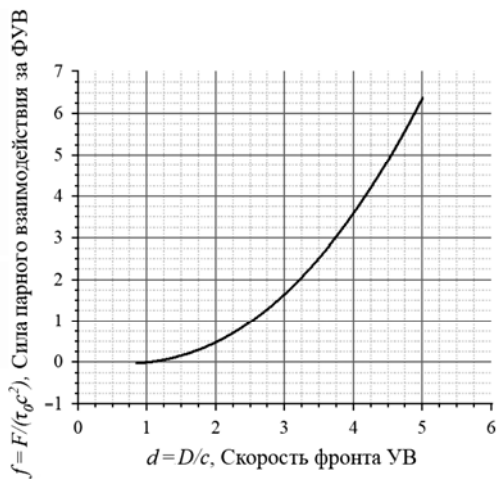


б

Рис. 2. Графики зависимости параметров вещества за ФУВ от скорости УВ: а – плотности, б – межчастичных расстояний



а



б

Рис. 3. Графики зависимости параметров вещества за ФУВ от скорости УВ: а – массовой скорости, б – силы парного взаимодействия

### Теория расчёта распределения частиц во фронте ударной волны

Стационарность УВ обуславливает особое ограничение: при прохождении ФУВ через частицы вещества, каждая частица проходит через один и тот же набор состояний. Под состоянием в этом случае подразумевается скорость частицы и равнодействующая сила.

Расчет распределения будем вести итерационным методом. Воспользуемся законом сохранения масс (6) и определением скорости для отдельных частиц

$$d = t_i(d - v_i), \quad (12)$$

$$v_i = v_{i-1} + \Delta v_i, \quad (13)$$

где  $v_i$  – безразмерная скорость  $i$ -ой частицы,  $\Delta v_i$  – разница безразмерных скоростей  $i$ -ой и  $(i-1)$ -ой частиц,  $t_i$  – безразмерная массовая линейная плотность в окрестностях  $i$ -ой частицы.

С учетом преобразований получим выражения удобные для расчета

$$l_i = (d - v_i)/d, \quad (14)$$

$$v_i = v_{i-1} + \frac{f_i}{d}, \quad (15)$$

где  $l_i = 1/t_i$  – межчастичное расстояние между  $i$ -ой и  $(i-1)$ -ой частиц,  $f_i$  – равнодействующая сила, действующая на  $i$ -ую частицу.

Вычисление равнодействующей силы  $f_i$  будем вести согласно формуле (16), выведенной из формулы (10) для всех частиц, а для последней частицы  $f_{count}$ , так как нет одного из соседей, нужно вводить дополнительную силу «поршня»  $F_{end}$ , которая бы

действовала на частицу со стороны отсутствующего соседа (17). По сути, сила является силой парного взаимодействия с соседней частицей. Эта сила «поршня» является решением системы (11).

$$f(l_i) = (l_i^{-m-1} - l_i^{-n-1}) / (m - n), \quad (16)$$

$$f_N = F_{end} - (l_N^{-m-1} - l_N^{-n-1}) / (m - n). \quad (17)$$

Тогда получим систему уравнений (18)

$$\begin{cases} f_i = \left( (l_{i+1}^{-m-1} - l_{i+1}^{-n-1}) - (l_i^{-m-1} - l_i^{-n-1}) \right) / (m - n), \\ f_N = F_{end} - \frac{l_N^{-m-1} - l_N^{-n-1}}{m - n}, \\ v_i = v_{i-1} + \frac{f_i}{d}, \\ l_i = (d - v_i) / d. \end{cases} \quad (18)$$

Для первой итерации задается начальное распределение межчастичных расстояний, по которым рассчитываются силы, а по ним скорости частиц, через которые снова определяются межчастичные расстояния. Таким образом, можно найти распределение массовой плотности, межчастичных расстояний, массовых скоростей, равнодействующих сил для различных скоростей УВ.

Также можно оценить ширину ФУВ. Ширина ФУВ считается как сумма межчастичных расстояний частиц, которые находятся в ФУВ. Частица находится в ФУВ, если она удовлетворяет условию (19). График зависимости ширины ФУВ от скорости ФУВ представлен на рис. 4.

$$l_1 - 0,99 \cdot (l_1 - l_N) \leq l_i \leq l_1 - 0,01 \cdot (l_1 - l_N), \quad (19)$$

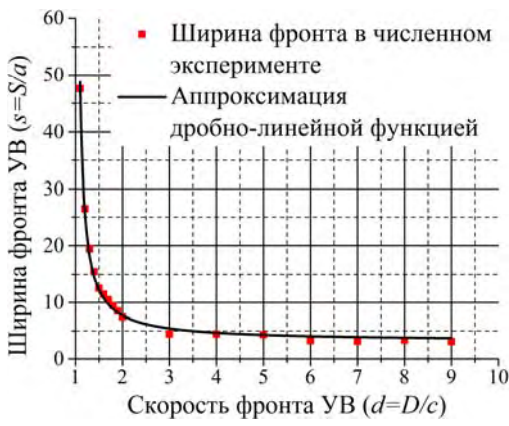


Рис. 4. График зависимости ширины ФУВ от скорости ФУВ

Данная методика применима для произвольных кристаллических структур металлов, в том числе и для кристаллического алюминия. Выбран алюминий для расчетов, потому как к настоящему времени известны многие параметры материала, в частности авторы работы [2], исследуя алюминий, проводили полноэлектронные расчеты в программе WIEN2k. Результаты были подтверждены экспериментами в Сандийских национальных лабораториях. Для сравнения своих результатов мы используем некоторые материалы исследования этих авторов.

Вернемся к расчетам структуры ФУВ. Чтобы перейти к другой структуре кристалла (рис. 5) следует только обобщить силы (20–22) и скорости звука на рассматриваемую структуру, и под межчастичными расстояниями понимать межплоскостные расстояния.

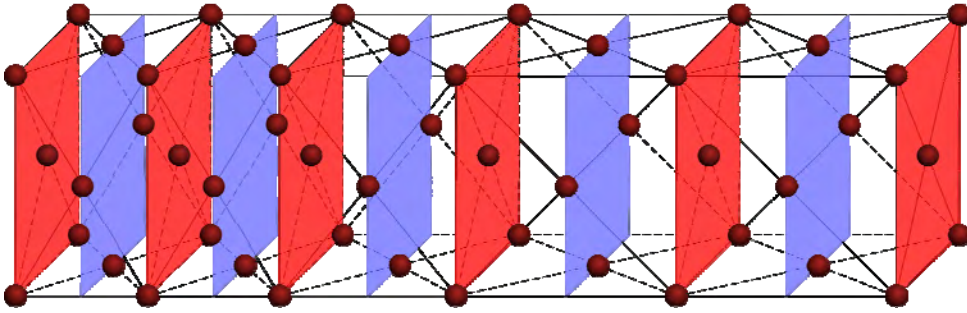


Рис. 5. Возможный вид кристаллической решетки на ФУВ

$$f(t) = \frac{4t \left( \left( \frac{\sqrt{2}t}{\sqrt{1+t^2}} \right)^m - \left( \frac{\sqrt{2}t}{\sqrt{1+t^2}} \right)^n \right)}{(m-n)(1+t^2)}, \quad (20)$$

$$f_i = \frac{8a l_{i+1} \left( \left( \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{a^2 + 4l_{i+1}^2}} \right)^m - \left( \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{a^2 + 4l_{i+1}^2}} \right)^n \right)}{(m-n)(a^2 + 4l_{i+1}^2)} - \frac{8a l_i \left( \left( \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{a^2 + 4l_i^2}} \right)^m - \left( \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{a^2 + 4l_i^2}} \right)^n \right)}{(m-n)(a^2 + 4l_i^2)}, \quad (21)$$

$$f_N = F_{end} - \frac{8a l_N \left( \left( \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{a^2 + 4l_N^2}} \right)^m - \left( \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{a^2 + 4l_N^2}} \right)^n \right)}{(m-n)(a^2 + 4l_N^2)}. \quad (22)$$

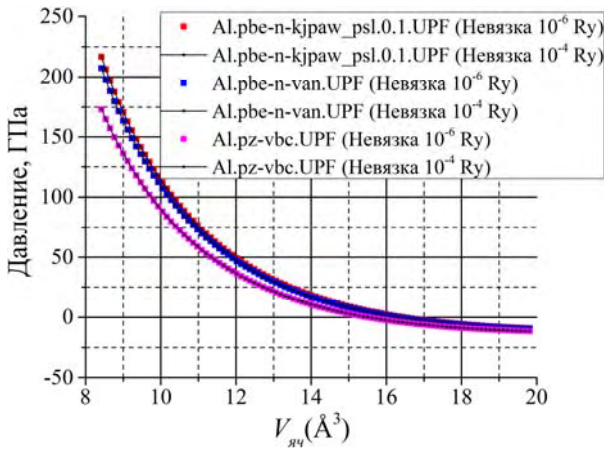
Необходимо знать потенциал взаимодействия. Его параметры мы подберем в следующем разделе работы.

## Определение параметров расчета электронной структуры в QE

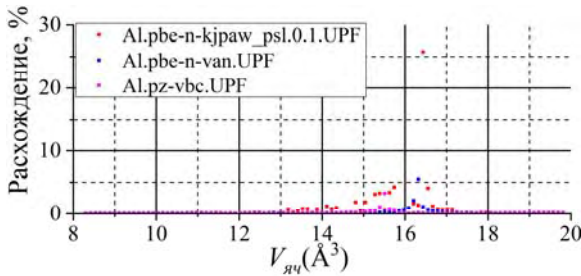
Параметры потенциала будем определять по кривой одноосного сжатия, построенной благодаря серии проведенных квантово-механических расчетов в QE. Программный пакет QE вычисляет электронную структуру методом псевдопотенциалов, за счет чего достигается выигрыш во времени, по сравнению с полнэлектронными расчетами, реализованными в пакете WIEN2k.

Была разработана методика определения оптимальных параметров расчета.

Для двух невязок, характеризующих точность вычислений, были проведены расчеты и построены графики всестороннего сжатия. Из графиков на рис. 6 видно, что результаты с невязками  $10^{-6}$  Ry и  $10^{-4}$  Ry согласуются друг с другом в сжатом состоянии с погрешностью в несколько сотен бар, наименьшее согласие наблюдается в несжатом состоянии. Для исследования сжатия кристалла данная погрешность рассматривается как удовлетворительная. Тогда следует выбирать параметры расчетов для меньшей невязки ( $10^{-4}$  Ry) – можно получить выигрыш во времени расчета и в объеме выделяемой оперативной памяти.



а



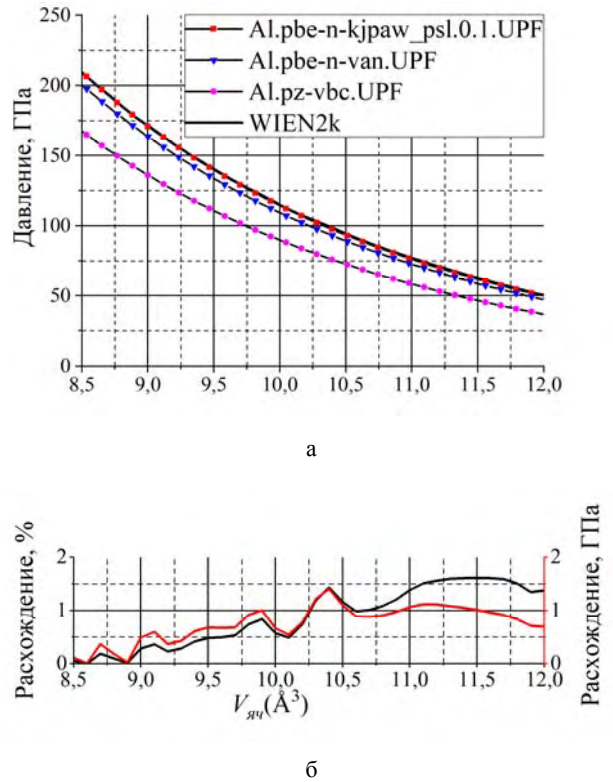
б

Рис. 6. Графики: а – кривых всестороннего сжатия, б – расхождения кривых всестороннего сжатия

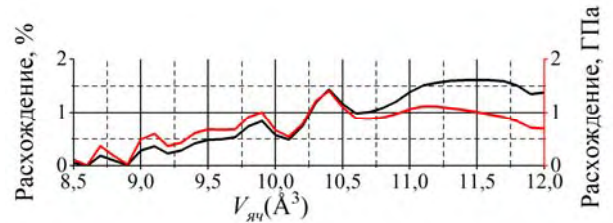
График кривых всестороннего сжатия, рис.6а, построен по расчетам в QE с тремя псевдопотенциалами для двух невязок. Рис. 6б – график расхождения кривых всестороннего сжатия для невязок  $10^{-6}$  и  $10^{-4}$  Ry.

## Сравнение с кривой из WIEN2k

Для выбора псевдопотенциала для расчетов по одноосному сжатию произведено сравнение кривых всестороннего сжатия из расчетов в QE и кривой по расчетам в WIEN2k (рис. 7), предоставленной авторами вышеназванной работы. Наиболее точно расчетам из WIEN2k соответствуют расчеты с псевдопотенциалом Al.pbe-n-kjpw\_psl.0.1.UPF, расхождение составляет не более 2 % (не более 2 ГПа).



а



б

Рис. 7. Графики: а - кривых всестороннего сжатия, б - расхождения кривых всестороннего сжатия

График сравнения кривых всестороннего сжатия, рис. 7а, получен из программного пакета QE с невязкой  $10^{-6}$  Ry и из WIEN2k. График расхождения кривых всестороннего сжатия, рис. 7б, получен из программного пакета QE с псевдопотенциалом Al.pbe-n-kjpw\_psl.0.1.UPF и из WIEN2k.

С псевдопотенциалом Al.pbe-n-kjpw\_psl.0.1.UPF были проведены расчеты и построена кривая одноосного сжатия, аппроксимация которой позволила получить параметры потенциала, записанного в форме Леннард-Джонса.



## Сравнение с результатами других источников

С найденными параметрами потенциала в форме Леннард-Джонса проведены расчеты ударной адиабаты и распределения частиц во фронте ударной волны в направлении [100]. Полученные в нашем численном эксперименте ударные адиабаты качественно не противоречат (рис. 8) экспериментальным данным и данным численного моделирования, рассмотренным в статье [3].

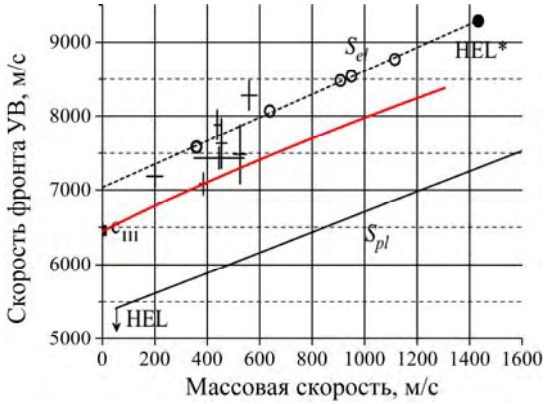


Рис. 8. График зависимости скорости ФУВ от массовой скорости вещества

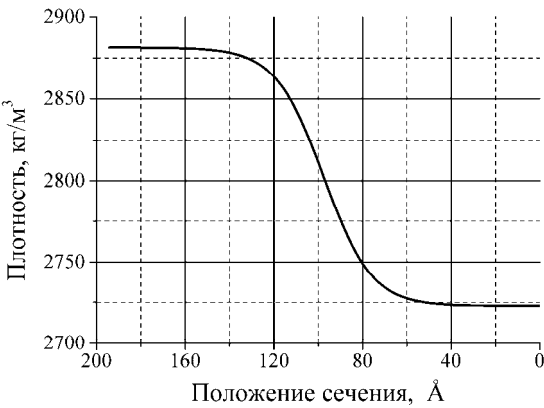


Рис. 9. График распределения плотности в ФУВ

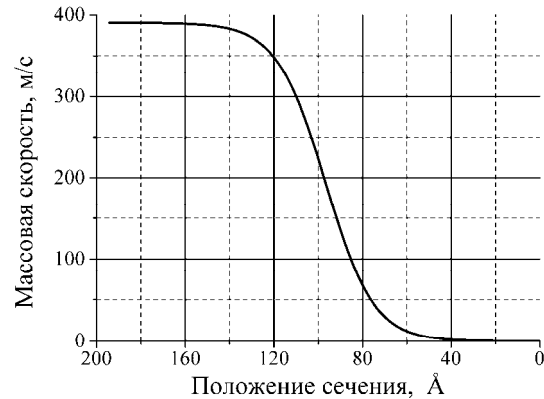


Рис. 10. График распределения массовой скорости в ФУВ

Средняя линия на рис. 8 соответствует упругой адиабате, полученной по рассмотренной выше методике для направления [100].

Помеченные крестиком точки на рис. 8 – результаты экспериментов с фемтосекундным лазером.

Пластическая адиабата  $S_{pl}$ , рис. 8, построена по экспериментальным данным.

Упругая адиабата  $S_{pl}$ , рис. 8, одноосного ударного сжатия по направлению [111] проходит через кружки, полученные с помощью МД моделирования.

## Результаты моделирования

Получены распределения величин на ФУВ (рис. 9–12) для направления [100] и скорости УВ 7090 м/с, что превышает продольную скорость звука на 10 %.

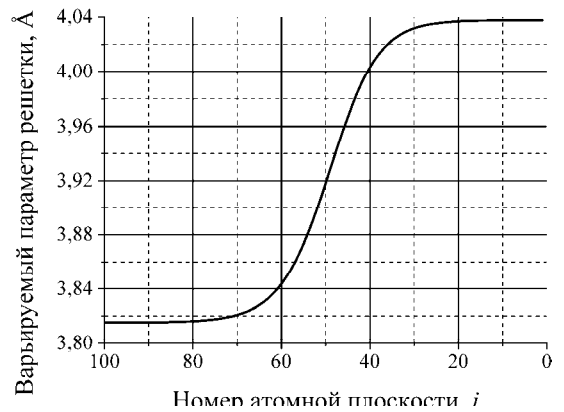


Рис. 11. График зависимости параметра решетки  $b$  от номера атомной плоскости в ФУВ

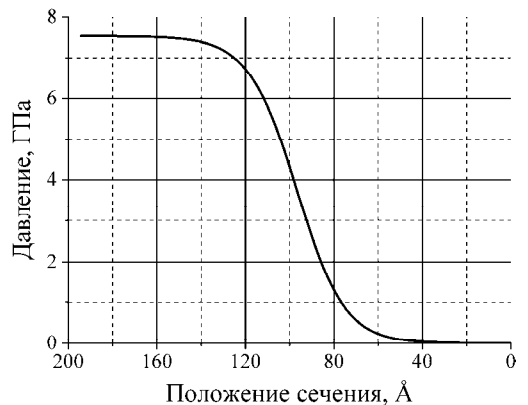


Рис. 12. График распределения нормального давления, приложенного к площадке (100)

Построен график зависимости ширины фронта от скорости ударной волны (рис. 13). При скорости УВ на 10 % больше продольной скорости звука ширина ФУВ составит около 170 ангстрем.

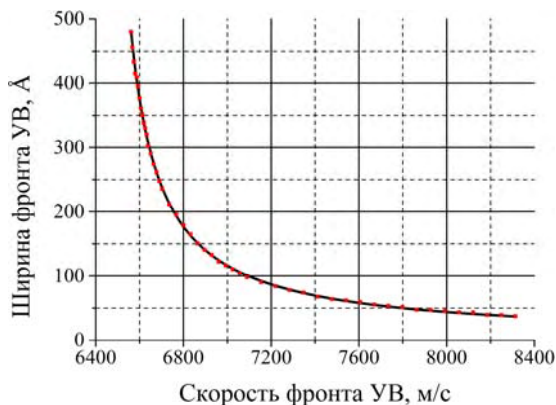


Рис. 13. График зависимости ширины ФУВ от скорости ФУВ в кристаллическом алюминии

### Заключение

На примере модели классических частиц в кристалле алюминия с ГЦК решеткой показана возможность расчета структуры фронта стационарной ударной волны, сопровождающейся упругим одноосным

сжатием вещества вдоль направления [100]. Полученные в данной работе межплоскостные расстояния в ГЦК-фазе алюминия для ФУВ в дальнейшем будут применяться при задании супер ячейки в квантово-механических расчетах в качестве исходного приближения. Это, в свою очередь, позволит определить распределение электронной плотности и структуру электрических полей вблизи ФУВ, а также исследовать устойчивость структуры вещества за ФУВ (упругого предвестника) и определить динамический предел текучести.

### Литература

1. Канель Г. И., Разоренов С. В., Уткин А. В., Фортвов В. Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996.
2. Кудасов Ю. Б., Сурдин О. М., Коршунов А. С., Павлов В. Н., Фролова Н. В., Кузин Р. С. Динамика решетки и фазовая диаграмма алюминия при высоких давлениях // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 144. Вып. 4 (10) / С. 765–773.
3. Жаховский В. В., Иногамов Н. А. Упруго-пластические явления в ультракоротких ударных волнах // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. Вып. 8 (10). С. 574–579.