

УДК 530.1/550.34

В.В. ИЛЬИНА, А.М. ИЛЬИН

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ НА НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ РАЗРУШЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СРЕДЫ

Методом классической молекулярной динамики проведено компьютерное моделирование волновых процессов на начальной стадии разрушения в деформируемой кристаллической среде. Показано, что появление разрывов среды и их размерные характеристики отражаются в частотном спектре фоновых волновых процессов.

Введение

Вопрос о возможности существования физических предвестников разрушения среды является исключительно актуальным как в области разработки конструкционных и строительных материалов, так и для создания физической основы надежного сейсмического прогноза. Известно, что процесс разрушения среды может рассматриваться как непрерывно развивающийся во времени [1], сопровождающийся возникновением и эволюцией зародышей разрушения, начиная уже с размеров порядка десятков нанометров. Этот подход хорошо сочетается с изложенными в работе [2] представлениями о сплошной среде, которая имеет сильно развитую иерархическую структуру в исключительно широком диапазоне масштабов: 10^{-8} м — 10^3 м начиная от нанокристаллитов.

Возникающие зародышевые разрывы в деформируемой среде могут являться физическими источниками низкоэнергетического акустического сигнала [3], а кроме того, их существование влияет на колебательные характеристики среды. Выделение и корректная интерпре-

тация таких особенностей могут составить основу для обнаружения стадий эволюции потенциального очага развития макроскопического разрушения. В частности, этот подход может оказаться весьма полезным для разработки методов прогноза землетрясений [3]. Использование на номасштабной области структурной иерархии исследуемой геофизической среды, стимулирует использование методов компьютерного моделирования, в частности, молекулярную динамику, на ограниченных по числу атомов блоках. В настоящей работе мы используем компьютерную модель условной кристаллической среды, реализованную в технике классической молекулярной динамики [4], для исследования особенностей характеристик волновых процессов, сопровождающих ее деформацию и возникающие в ней разрывы сплошности.

1. Компьютерный эксперимент

Моделирование объектного кристалла и исследование его характеристик выполнялись в среде Delphi. Модельный двумерный кристалл построенный из 2400 атомов кремния, имел гексагональную структуру, показанную на рис. 1.

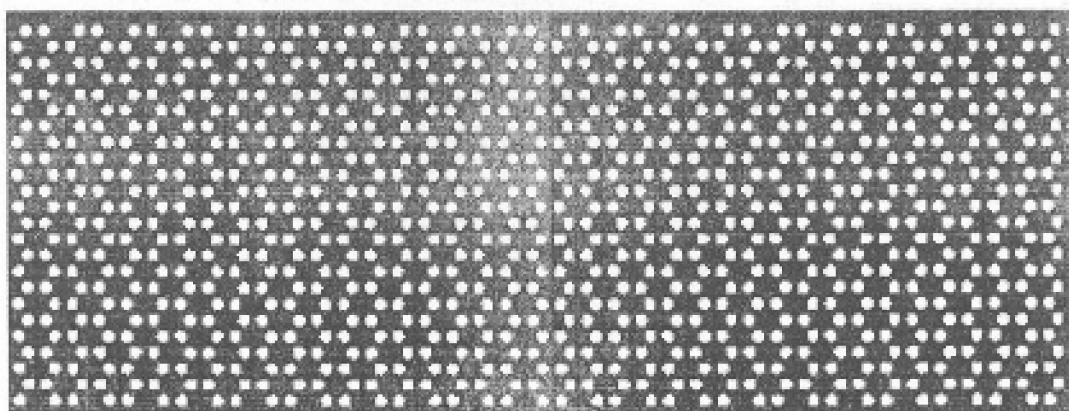


Рис. 1. Модельная кристаллическая среда

Потенциал взаимодействия Si-Si брался в виде хорошо известного эмпирического потенциала Tersof [5], который широко используется при моделировании углеродных наносистем. Для численного интегрирования использовался алгоритмический метод Verlet [6], обеспечивающий оптимальное соотношение между поддерживаемой точностью расчетов и затратами компьютерного времени при величине временного шага равной $4 \cdot 10^{-16}$ с.

Деформация кристалла растяжением вдоль выбранной оси осуществлялась смещениями атомов крайних граничных слоев, перпендикулярных данной оси (в нашей компьютерной программе – ось X). С целью минимизировать влияние способа деформации на конечный результат использовались два метода деформирования кристалла. Первый состоял в смещении атомов границы единичным скачком с последующим периодом релаксации. При этом атомы второго (прилегающего к границе) и последующих слоев занимали новые, соответствующие деформированному состоянию кристалла положения, что вело к релаксации деформированного на величину скачка кристалла в целом.

На рисунке 2 показаны графики распространения фронта и последующих фаз продольной волны деформации от границы в объем кристалла. В момент времени $t = 0$ граница кристалла скачком перемещается в новое положение (график 1). Поскольку в начальном положении граница занимала позицию с координатой $X = 0$, то

после смещения атомы границы попадают в область $X < 0$. Для удобства сопоставления графиков на рис.2 зависимости для слоев атомов, расположавшихся на различной глубине, смешены относительно друг друга.

Например, отчетливо выраженная особенность на графике 2 рисунка 2 соответствует времени прохождения фронта деформации через это сечение кристалла, расположенное примерно на расстоянии 2 нм от границы. Дальнейшее не монотонное поведение графика связано с колебательными процессами в кристалле. Атомная плоскость, соответствующая графику 3 расположена на расстоянии 10 нм от границы. Из конфигурации графика 3 видно, что за выбранное время расчета деформационная волна еще не достигает этого слоя атомов, расположенного значительно дальше от границы в направлении центра кристалла.

Аналогичные измерения проводились и для альтернативного многоступенчатого процесса деформации, идущего последовательными небольшими смещениями границы вдоль оси X.

Представленные результаты иллюстрируют также и методику возможного определения отношения скоростей V_p / V_s продольной и поперечной волн деформации. При определении скорости волны сдвиговой деформации использовалась аналогичная методика, но сама деформация задавалась ступенькой сдвига вдоль оси Y, перпендикулярной оси X. Использовались два способа сдвиговой деформации: в первом вся линия

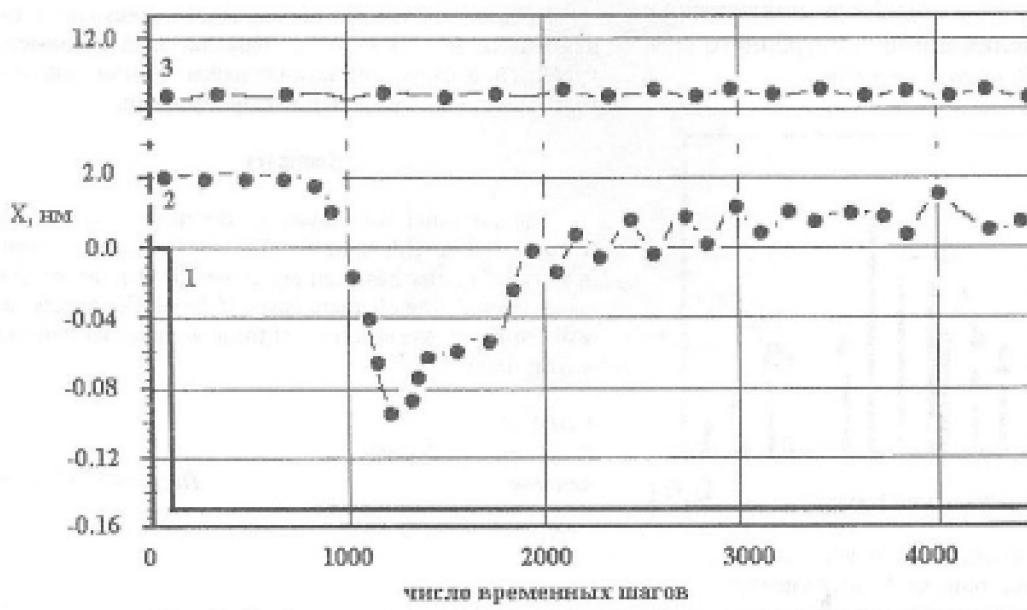


Рис. 2. Графики распространения продольной волны после деформации скачком

границы в целом подвергалась определенному сдвигу с последующей релаксацией, или смешался небольшой участок границы в центре. Обнаружено, что при источнике сдвиговой волны, локализованном в центральной части границы, ее скорость несколько выше, чем в случае, когда источником сдвига является вся граница.

По-видимому, это связано с тем, что при меньшем размере источника сдвига эффективный модуль сдвига (жесткость среды) увеличивается. Следует отметить, что первоначальный импульс чистого сдвига на границе очень быстро трансформируется в смешанный тип волны в объеме кристалла, что затрудняет измерение парциальных скоростей. В среднем отношение скоростей в обоих методах модельного деформирования составило около 1.75 -1.8. Это значение неплохо согласуется с известными данными для типичной среды типа кварца [3].

2. Частотные характеристики волнового поля

Были исследованы особенности колебательных спектров деформируемого идеального кристалла, а также содержащего разрывы, которые создавались программным путем, вследствие уничтожения связей между частью атомов, расположенные вдоль направления Y. На рисунке 3 представлены в виде гистограмм частотные спектры волнового поля, возбуждающегося в кристалле, деформируемом растяжением.

Спектр 1 рисунка 3 соответствует сплошному кристаллу, спектр 2 показывает изменения, связанные с появлением внутреннего разрыва среды, размер которого составлял примерно 1/3 высоты кристалла. Спектры 3 и 4 иллюстрируют эффект увеличения длины внутреннего разрыва на 25% и 40% соответственно.



Рис.3. Частотные спектры волнового поля среды в различных состояниях. 1- без разрывов, 2 – после возникновения разрыва, 3 – длина разрыва увеличена на 25%, 4- 40%.

Время эксперимента выбиралось достаточно большим, чтобы обеспечить наблюдение за волновым полем кристалла как в процессе деформации до появления разрыва, так и в течение достаточно большого времени после события.

Очевидны существенные изменения в частотном спектре кристалла в результате возникновения внутренних разрывов. В основном они связаны с появлением низкочастотных составляющих.

Предварительные результаты показывают эффективность применения молекулярной динамики к исследованию волновых полей в деформируемой среде с разрывами. Возможно, что на основе таких подходов удастся разработать алгоритм прогнозирования эволюции потенциально-го очага разрушения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Журков С.Н. Вопросы современной физики прочности твердых тел. Л., Наука, 1984.
2. Садовский М.А., Балховитинов Л.Г., Писаренко В.Ф. Деформирование геофизической среды и сейсмический процесс. М.: Наука, 1987.
3. Соболев Г.А., Пономарев А.В. Физика землетрясений и предвестники. М.: Наука, 2003.
4. Хефман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. Пер. с англ. М.: Наука, 1990.
5. Tersoff J. The Potential for Carbon Composition Simulation // Phys. Rev. Lett. 1988, V.61, P.2879-2883
6. Verlet L. Computer Experiments on Classical Fluids and Properties of Lennard-Jones Molecules // Phys.Rev. 1967, V.159. P.98-103.

Резюме

Кристалдың орталы компютерлі молекуларлы-динамикалық модель күралған біркелкі ішкі жарапысты күрайтын, деформация кезінде пайды болған жиілікті толқындық ерістің сипаттамасын зерттейтін.

Summary

The computer simulation of the initial stage of the fracture process with using a molecular dynamics technique in a crystal matter has been performed. It was shown, that geometry and size characteristics of breaking defects are revealed in a power spectrum of the low-energy background wave processes.

*КазГАСА,
КазНУим.аль-Фараби
Алматы*

Поступила 17.03.09