

SIMULACE ŠÍŘENÍ NAPĚŤOVÝCH VLN V KRYSTALECH MĚDI A NIKLU

Vladimír PELIKÁN¹, Petr HORA², Anna MACHOVÁ³

Abstract: We present large-scale molecular dynamic simulations of wave propagation in fcc copper and fcc nickel based on an N -body potential model which gives a good description of anisotropic elasticity. We show that the basic behavior of the simulations is in agreement with the predictions of continuum models.

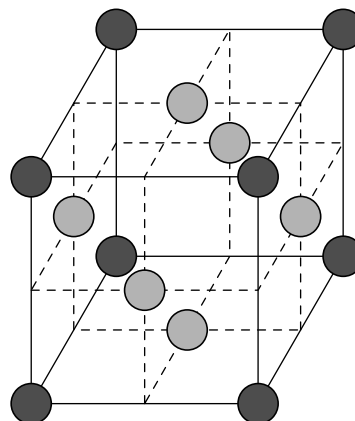
Keywords: molecular dynamics, wave propagation, fcc copper and fcc nickel

1. ÚVOD

V tomto příspěvku jsou popsány rozsáhlé 3D simulace šíření elastických vln v fcc krystalech, viz obr. 1, mědi a niklu, založené na metodách molekulární dynamiky. Správné chování simulace je testováno porovnáním získaných rychlostí napěťových vln s teorií kontinua a popsáno je chování napěťových vln při povrchovém buzení. Při simulacích byl použit vícečásticový potenciál Finnisova-Sinclairova typu pro kovy, viz Finnis a Sinclair (1984) a Ackland et al. (1987) a (1997).

Úlohy tohoto typu mají fyzikální smysl pouze tehdy, nejsou-li znehodnoceny odrazy napěťových vln od volných povrchů zkoumaného vzorku. Vlastní modely musí proto být značně rozsáhlé a simulace na takovýchto modelech jsou potom realizovatelné pouze za masivního nasazení paralelních programovacích technik.

Tato práce navazuje na příspěvky Pelikán et al. (2003) – (2005), které se týkaly šíření napěťových vln v bcc krystalech železa.



Obr. 1. fcc struktura krystalu.

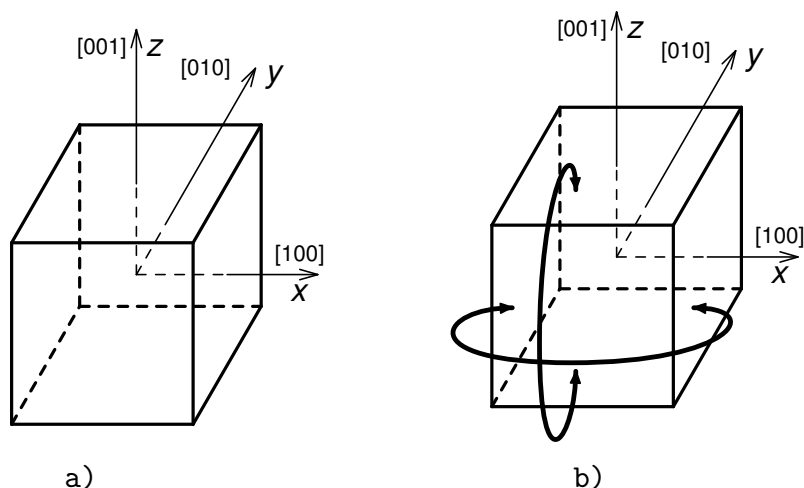
2. POPIS SIMULACÍ

Veškeré zde zmíněné simulace byly provedeny na dvou typech vzorků. Prvním typem byla krychle o hraně 300 atomů (tj. celkem 107 460 900 atomů), viz obr. 2a, a druhým nekonečná deska o tloušťce 300 atomů ve směru osy y , viz obr. 2b. Ve zbývajících dvou směrech bylo nekonečnosti dosaženo aplikací periodických okrajových podmínek na krychlový vzorek o hraně 300 atomů (tj. celkem 107 820 000 atomů).

¹Mgr. Vladimír Pelikán, CDM ÚT AV ČR, Veleslavínova 11, 301 14 Plzeň, tel.: +420 377236415, e-mail: Pelikan@cdm.it.cas.cz

²Ing. Petr Hora, CSc., CDM ÚT AV ČR, Veleslavínova 11, 301 14 Plzeň, tel.: +420 377236415, e-mail: Hora@cdm.it.cas.cz

³Ing. Anna Machová, CSc., ÚT AV ČR, Dolejškova 5, 182 00 Praha 8, tel.: +420 266053023, e-mail: Machova@it.cas.cz



Obr. 2. Geometrie použitých vzorků.

V obou případech se jednalo o zcela homogenní, ideálně povrchově zrelaxované fcc krystaly mědi (mřížková konstanta $a_0 = 3,615 \text{ \AA}$) a niklu ($a_0 = 3,524 \text{ \AA}$) při teplotě 0 K.

Na těchto vzorcích byly postupně provedeny čtyři zcela odlišné druhy testů:

1. celoplošné buzení ve směru osy y na vnějších stěnách, kolmých na osu y ,
2. lokální buzení ve směru osy y uprostřed vnějších stěn, kolmých na osu y ,
3. celoplošné buzení ve směru osy y v centrální rovině, kolmé na osu y ,
4. všesměrové lokální buzení 14 centrálních atomů vzorku.

V každém testu bylo uvažováno skokové buzení v čase dle Heavisideovy funkce s konstantním budícím napětím $\sigma_A = 1,35 \text{ GPa}$ a vždy se jednalo o tlak na vnější stěny, případně o centrální explozi. Velikost simulačního kroku byla vždy 10^{-14} s a všechny testy probíhaly vždy od kroku 0 do kroku 1200. V každém simulačním kroku byla monitorována jak celková energetická bilance (kinetická energie, potenciální energie a práce vnějších sil), tak celkový počet interakcí jednotlivých atomů, jehož časový průběh vždy zcela jednoznačně odpovídal charakteru použitého buzení a ve všech pokusech se tedy jednalo o *elastické deformace*.

Veškeré výpočty byly provedeny původními MPI-paralelními aplikacemi vytvořenými v jazyce *Fortran 90* pod systémem Debian GNU/Linux na 30 procesorech výpočetního clusteru *MINOS* Západočeské univerzity v Plzni (kapacita 16 uzlů, každý o dvou procesorech AMD Athlon MP, 1600 MHz, 1 Gbyte operační paměti), přičemž vyčíslení jednoho simulačního kroku trvalo v průměru 83 sekund pro případ krychle a 90 sekund v případě nekonečné desky.

3. ELASTICKÉ VLASTNOSTI MĚDI A NIKLU

Při simulacích byly použity hodnoty elastických konstant mědi a niklu při teplotě 0 K, které jsou uvedeny v následující tabulce. Použijeme-li tyto konstanty a vypočteme z teorie kontinua rychlosti šíření napěťových vln v některých význačných směrech, jako např. $\langle 100 \rangle$ – hrana, $\langle 110 \rangle$ – stěnová úhlopříčka a $\langle 111 \rangle$ – tělesová úhlopříčka, dostaneme – viz Tab. 2:

	c_{11} [GPa]	c_{12} [GPa]	c_{44} [GPa]	ρ [kg m^{-3}]
Cu	168.4	121.4	75.4	8937.0
Ni	261.2	150.8	131.7	8910.7

Tab. 1. Elastické konstanty a hustota mědi a niklu při teplotě 0 K.

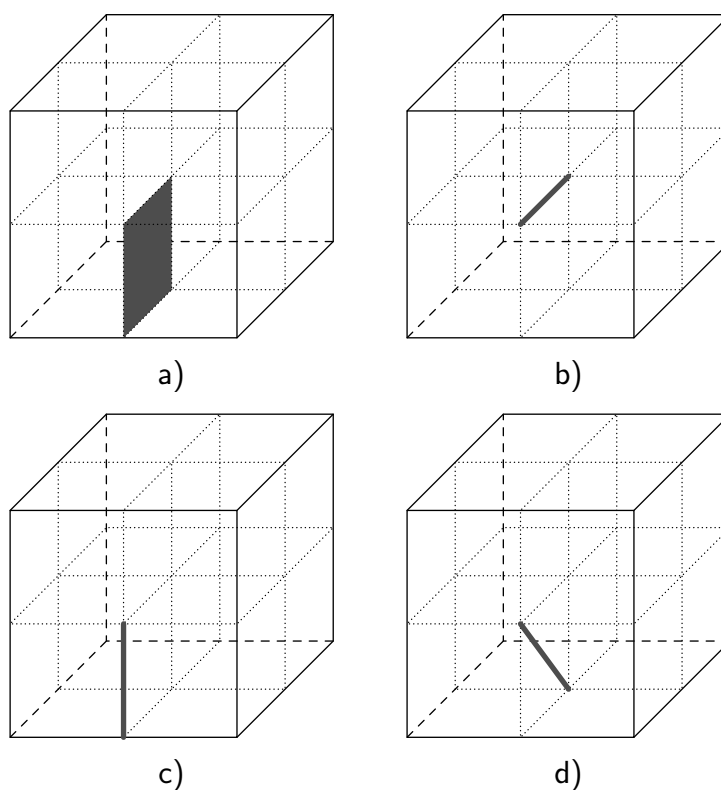
Rychlost	Cu			Ni		
	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
c_L [m s^{-1}]	4341	4965	5156	5414	6156	6384
c_T [m s^{-1}]	2905	1622	2137	3844	2489	3009
c_t [m s^{-1}]	2905	2905	2137	3844	3844	3009

Tab. 2. Rychlosti šíření napěťových vln v krystalech mědi a niklu pro význačné směry.

4. VÝSLEDKY SIMULACÍ

Pro ilustraci dosažených výsledků jsou v této kapitole uvedeny různé grafy rozložení modulu rychlostí (tj. absolutní hodnoty rychlostních vektorů) pro vybrané druhy testů. Při zobrazování modulu rychlosti, který je úměrný kinetické energii, vyniknou nejlépe čela napěťových vln.

Vzhledem ke kubické symetrii uvažovaných materiálů lze vykreslovat pouze dílčí oblasti celého vzorku, viz následující obrázek:

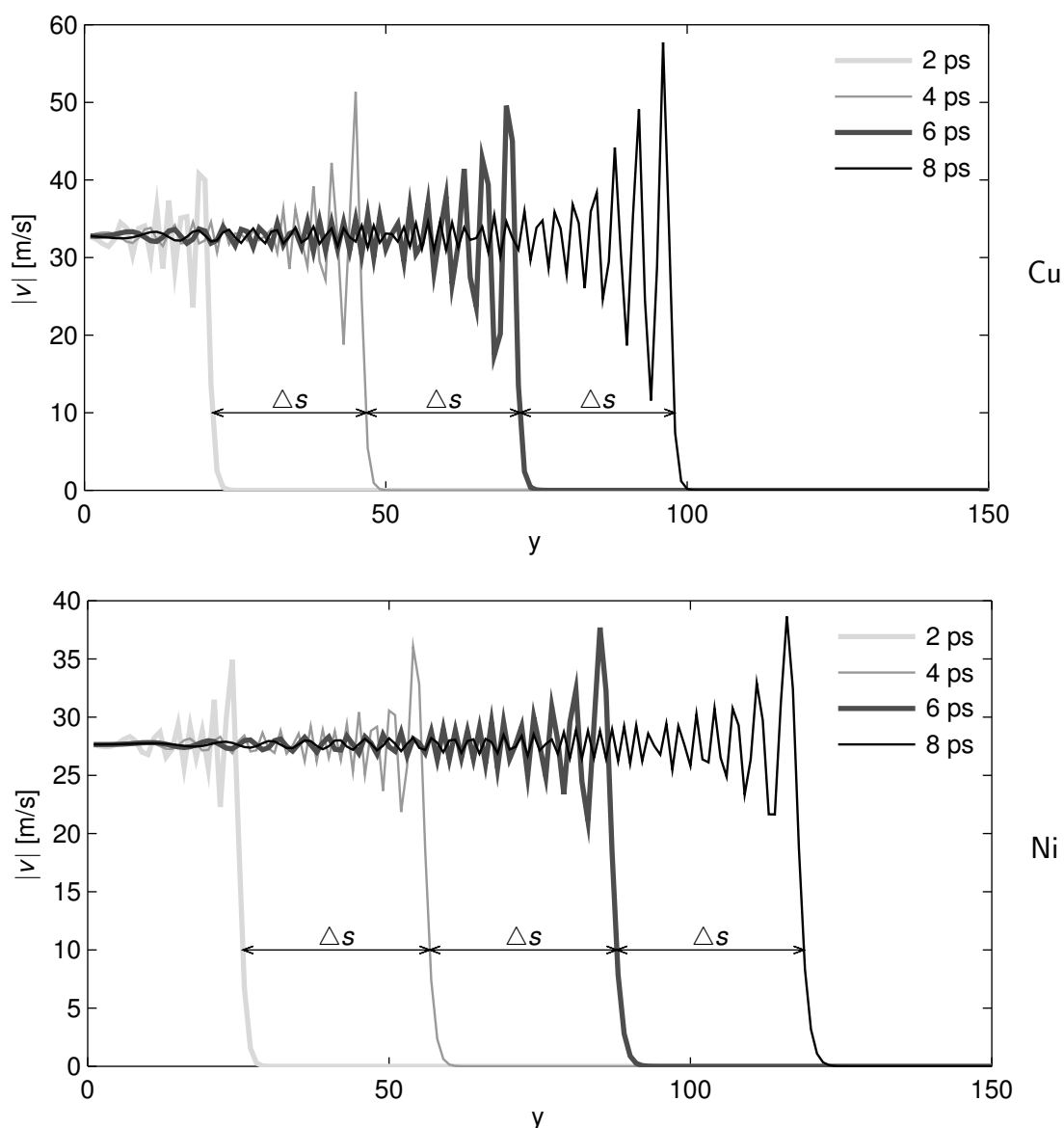


Obr. 3. Schéma zobrazovaných oblastí, použitých v následujících obrázcích.

4.1 Rychlý celoplošný tlak na povrch nekonečné desky.

Na obr. 4 jsou vyneseny hodnoty modulů rychlostí jednotlivých atomů na ose y , viz obr. 3b, pro časy: 2, 4, 6 a 8 ps od počátku simulace, tj. v simulačních krocích 200, 400, 600 a 800. Hodnoty pro měď jsou zobrazeny v horní části, pro nikl v části spodní. Na vodorovné ose je vždy uvedeno pořadí atomární vrstvy krystalu – odpovídající kartézská souřadnice atomu se z něho získá vynásobením mřížkovou konstantou ($a_0 = 3,615 \text{ \AA}$ pro měď, $a_0 = 3,524 \text{ \AA}$ pro nikl). Průběhy na tomto obrázku lze použít pro stanovení rychlosti šíření podélné vlny ve směrech $\langle 100 \rangle$. Teoretická hodnota pro tyto směry uvedená v Tab. 2 činí pro měď 4341 m/s a

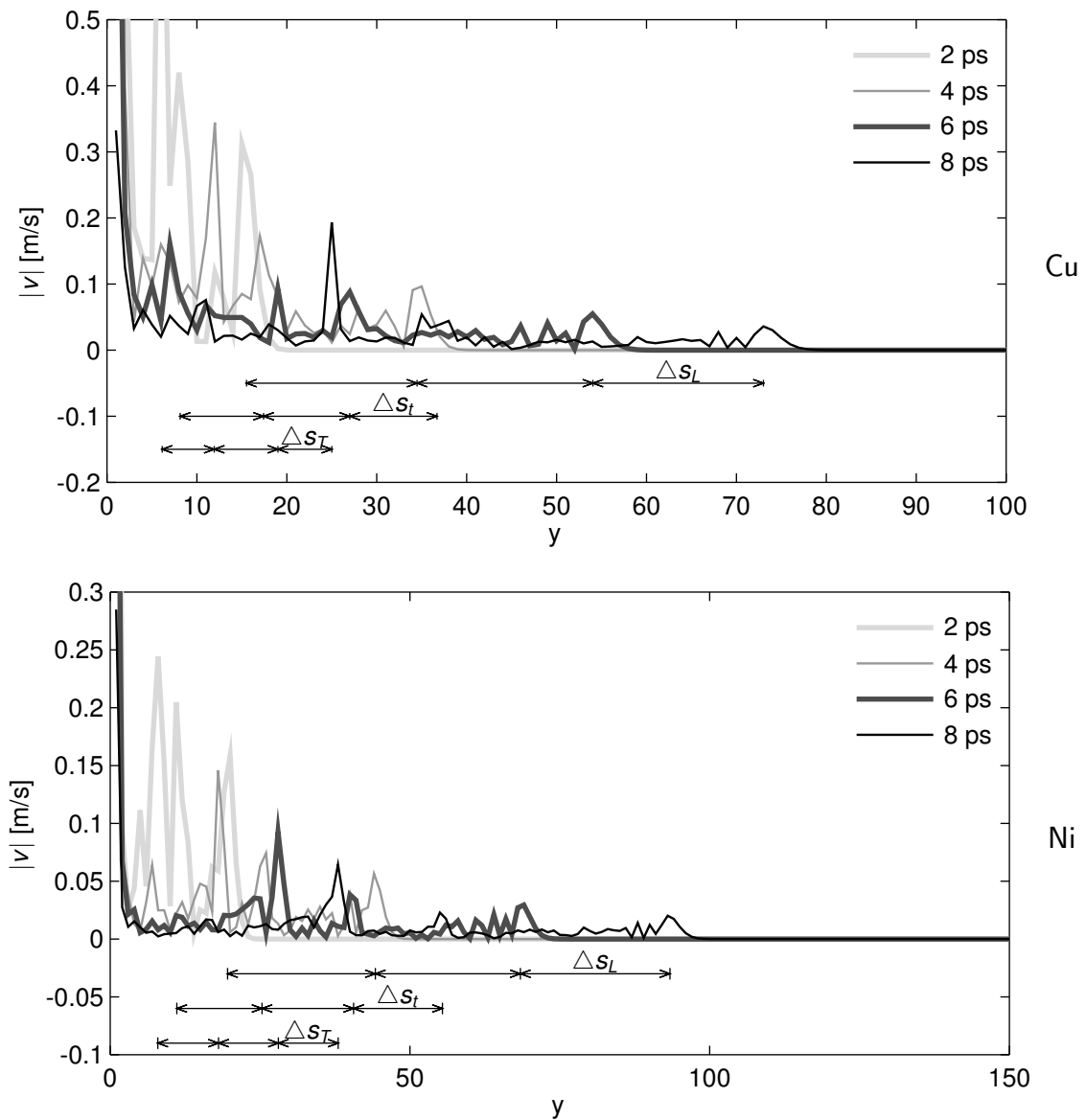
5414 m/s pro nikl. Hodnota odečtená z grafu je přibližně 4433 m/s pro měď a 5291 m/s pro nikl. Hodnoty se tudíž liší asi o 2,1% pro měď a cca 2,3% pro nikl, což je výsledek více než uspokojivý.



Obr. 4. Moduly rychlostí jednotlivých atomů na ose y v simulačních časech 2, 4, 6 a 8 ps.

4.2 Rychlý lokální tlak uprostřed vnější stěny krychlového vzorku.

Na obr. 5 jsou vyneseny hodnoty modulů rychlostí jednotlivých atomů na diagonále zkoumaného čtverce 3a, viz obr. 3d, pro časy: 2, 4, 6 a 8 ps od počátku simulace, tj. v simulačních krocích 200, 400, 600 a 800. Hodnoty pro měď jsou opět zobrazeny v horní části a pro nikl v části spodní. Na vodorovné ose je vždy uvedeno pořadí atomární vrstvy krystalu – odpovídající vzdálenost se z něho získá vynásobením mřížkovou konstantou a $\sqrt{2}$ (jedná se o stěnovou diagonálu). Průběhy na tomto obrázku lze analogickým způsobem jako v předchozím odstavci použít pro stanovení rychlostí šíření napěťových vln tentokrát však ve směrech $\langle 110 \rangle$. Teoretické hodnoty pro tyto směry, hodnoty odečtené z grafu a jejich relativní odchylky jsou uvedeny v Tab. 3. Z těchto odchylek je opět patrná velice dobrá shoda s teorií kontinua.

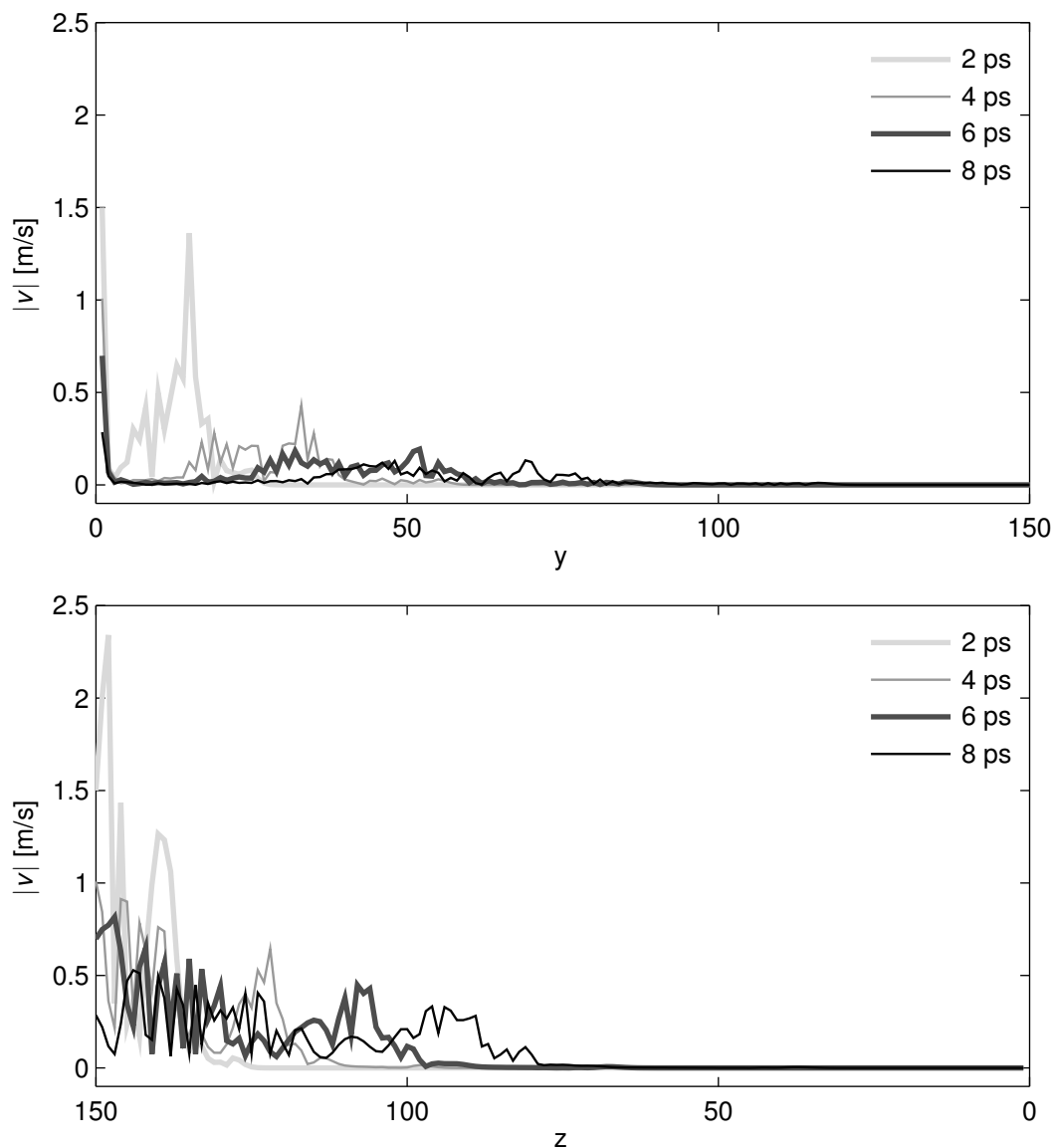


Obr. 5. Moduly rychlostí jednotlivých atomů na diagonále.

Rychlost	Cu			Ni		
	Teorie	Simulace	Chyba [%]	Teorie	Simulace	Chyba [%]
c_L [m s^{-1}]	4965	5154	3,80	6156	6378	3,61
c_T [m s^{-1}]	1622	1863	14,84	2489	2749	10,43
c_t [m s^{-1}]	2905	2689	7,43	3844	3929	2,22

 Tab. 3. Porovnání rychlosti šíření napěťových vln ve směru $\langle 110 \rangle$.

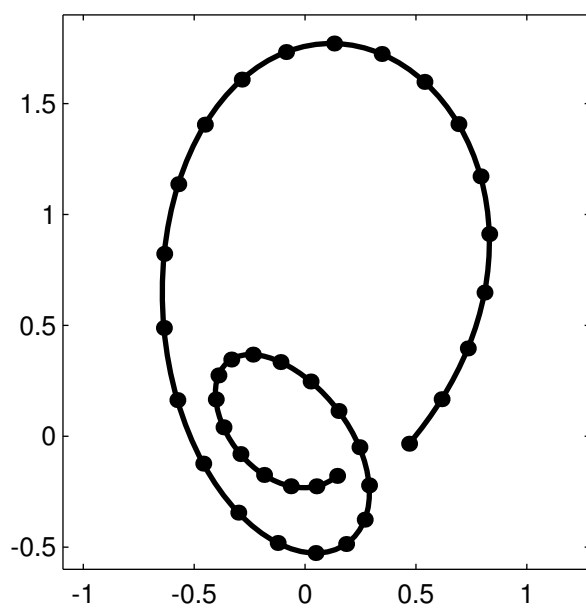
Porovnání modulů rychlosti jednotlivých atomů niklu na horní (vnitřní), viz obr. 3b, respektive levé (povrchové), viz obr. 3c, hraně zkoumaného čtverce 3a je znázorněno na obr. 6 opět pro simulační časy 2, 4, 6 a 8 ps. Z porovnání je zde patrná existence dominantní Rayleighovy vlny, která se po povrchu vzorku šíří. Na obrázku si lze též povšimnout menšího poklesu amplitudy povrchových vln.



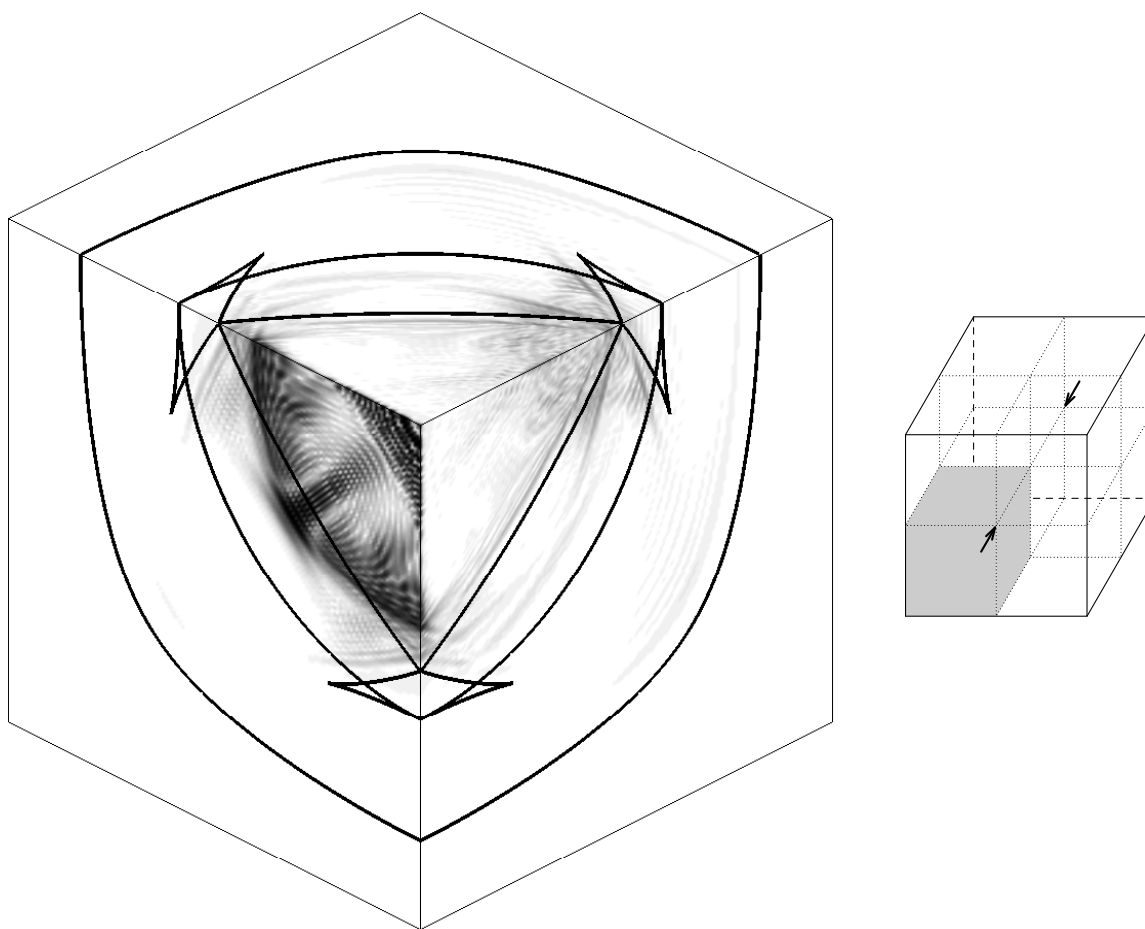
Obr. 6. Porovnání modulů rychlosti jednotlivých atomů niklu uvnitř (nahore) a na povrchu (dole) v simulačních časech 2, 4, 6 a 8 ps.

Obr. 7 zobrazuje průběh závislosti složek rychlosti v_z na v_y vybraného atomu na povrchu vzorku v blízkosti buzení (vzdálenost $10a_0$ ve směru $[001]$, viz obr. 3c) v čase 2,1 ps až 2,84 ps. Zcela zřejmý je eliptický pohyb atomu. Lze tudíž předpokládat, že po povrchu vzorku se šíří v daném směru Rayleighova povrchová vlna.

Komplexní pohled na stav simulace v čase 8 ps poskytuje obr. 8. Jedná se o výřez krychlového vzorku niklu, jak je schematicky znázorněno na obrázku vpravo a opět se jedná o zobrazení modulu rychlosti jednotlivých atomů. Do obrázku jsou rovněž zakreslena čela jednotlivých teoretických grupových rychlostí, ze kterých je opět patrná velice dobrá shoda s teorií kontinua.



Obr. 7. Průběh v_z versus v_y atomu na povrchu vzorku.



Obr. 8. Lokální tlak uprostřed vnější stěny v čase 8 ps.

5. ZÁVĚR

V Ackland et al. (1987) jsou publikovány rovněž elastické konstanty pro stříbro (Ag) a zlato (Au). Nic nám tudíž nebránilo v provedení analogických výpočtů i pro tyto dva vzácné kovy. Takto dosažené výsledky zde však neuvádíme jednak pro omezený rozsah tohoto příspěvku a jednak z důvodu absolutní absence odpovídajících laboratorních experimentů, vůči kterým by bylo možno tyto výsledky ověřit.

Na tomto místě je vhodné poznamenat, že vynásobíme-li v fcc-struktuře mřížkové konstanty v libovolných dvou směrech $\sqrt{2}$, dostaneme strukturu bcc, avšak v diagonální orientaci. Struktura bcc se v tomto případě jeví, jakoby byla pootočena o 45° kolem třetího, tj. nezměněného směru. Odtud je zcela pochopitelné, že analogické výpočty jsme provedli i pro α -železo. Ani tyto výsledky zde však neuvádíme, jakkoliv jsou zcela v souladu s našimi výsledky z předchozích let - viz Pelikán et al. (2005).

Z námi dosažených výsledků je patrné, že takto použité vícečásticové potenciály Finnisova-Sinclairova typu jsou pro simulaci šíření napěťových vln v fcc-strukturách vhodné a zaručují poměrně dobrou shodu s teorií kontinua.

Cílem našeho budoucího výzkumu bude vyšetřování chování napěťových vln při postupu přes materiálovou trhlinu a studium vlivu velikosti buzení na nelineární chování modelu.

Poděkování: Příspěvek vznikl na základě podpory záměru ÚT AV ČR AV0Z20760514.

LITERATURA

- Finnis, M. W., Sinclair, J. E., 1984. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Phil. Mag. A*, Vol. 50. pp. 45-55.
- Ackland, G. J., Tichy, G., Vitek, V., Finnis, M. W., 1987. Simple N-body potentials for the noble metals and nickel *Phil. Mag. A*, Vol. 56. pp. 735-756.
- Ackland, G. J., Bacon, D. J., Calder, A. F., Harry, T., 1997. Computer simulations of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential. *Phil. Mag. A*, Vol. 75. pp. 713-732.
- Pelikán, V., Hora, P., Machová, A., 2003. Paralelní programování v úlohách molekulární dynamiky. *Proceedings, 19th Conference Computational mechanics 2003*.
- Pelikán, V., Hora, P., Machová, A., 2004. Simulace na rozsáhlých modelech v úlohách molekulární dynamiky. *Proceedings, 20th Conference Computational mechanics 2004*.
- Pelikán, V., Hora, P., Machová, A., 2005. Simulace šíření napěťových vln metodami molekulární dynamiky. *Proceedings, 21st Conference Computational mechanics 2005*.