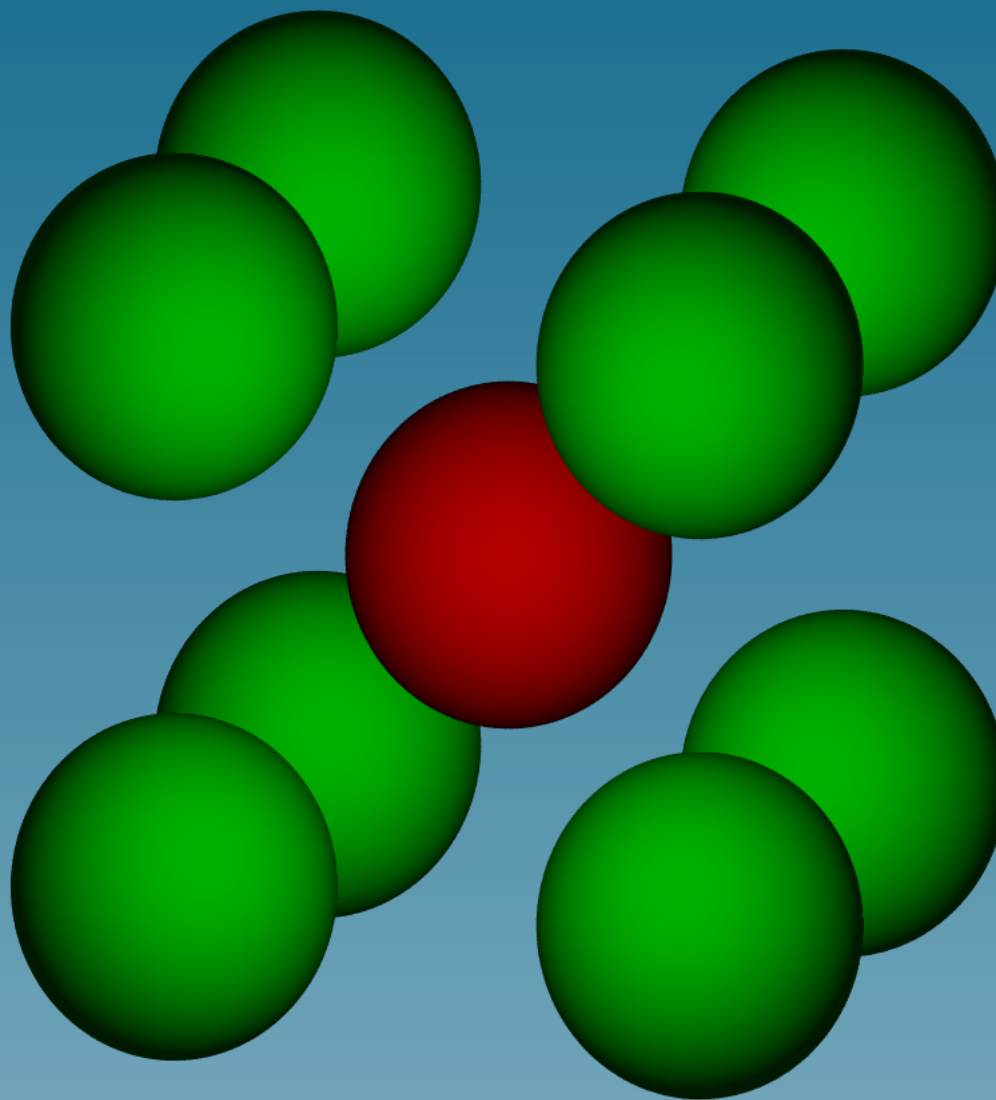
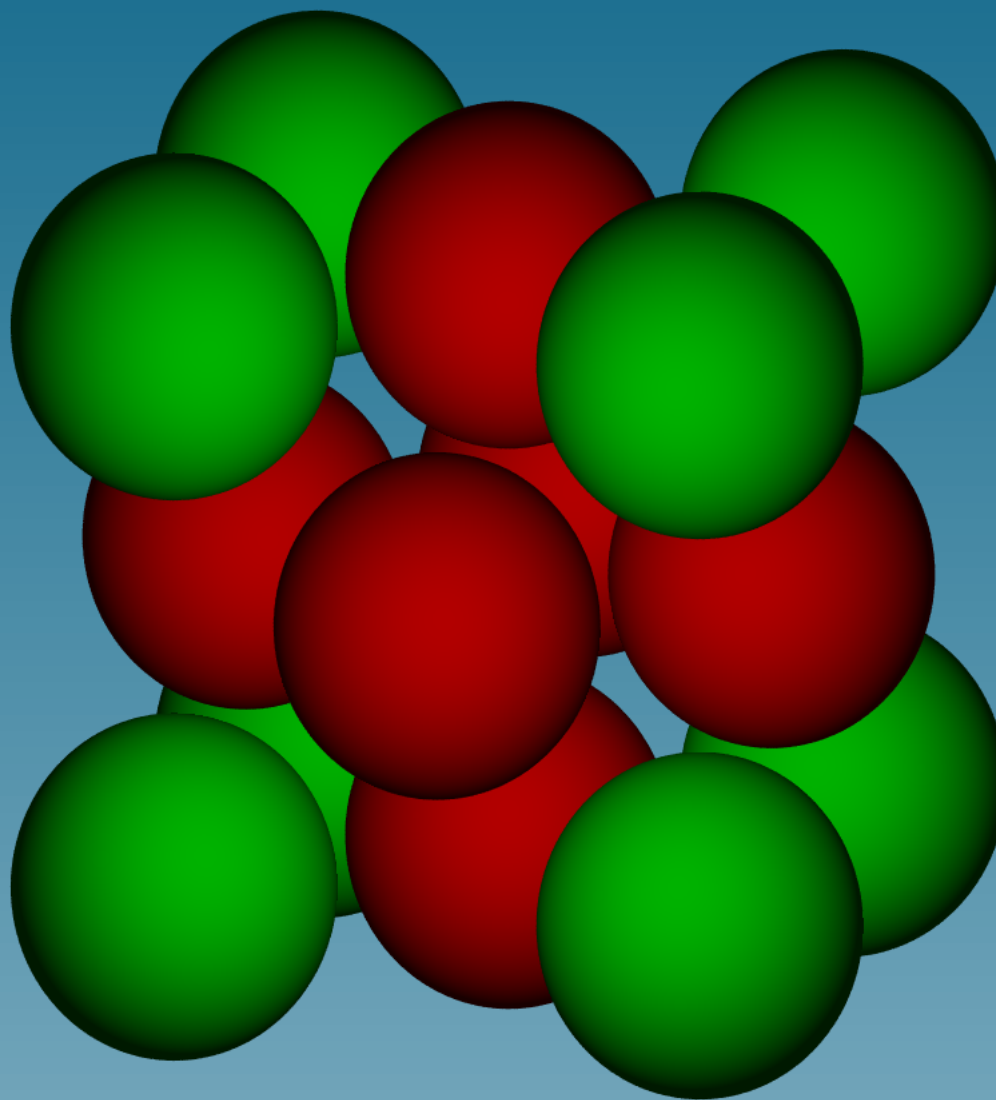


SIMULACE ŠÍŘENÍ NAPĚŤOVÝCH VLN V KRYSTALECH MĚDI A NIKLU

V. Pelikán, P. Hora, A. Machová
Ústav termomechaniky AV ČR

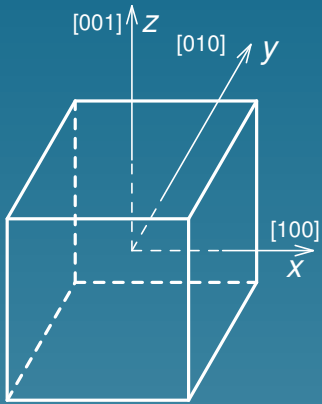
Příspěvek vznikl na základě podpory záměru ÚT AV ČR AV0Z20760514.



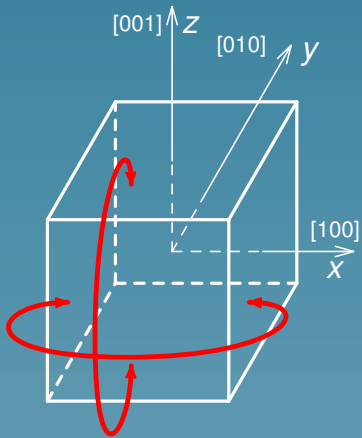


- Rozsáhlé 3D simulace šíření elastických vln v fcc krystalech mědi a niklu, založené na metodách molekulární dynamiky.
- Správné chování simulace je testováno porovnáním získaných rychlostí napěťových vln s teorií kontinua.
- Popsáno je chování napěťových vln při povrchovém buzení.

Popis simulací



krychle o hraně 300 atomů,
tj. celkem 107 460 900 atomů



nekonečná deska o tloušťce 300 atomů ve směru osy y .
Nekonečnosti dosaženo aplikací periodických okrajových podmínek na krychlový vzorek o hraně 300 atomů, tj. celkem 107 820 000 atomů.

- homogenní, ideálně povrchově zrelaxovaný fcc krystal mědi ($a_0 = 3,615 \text{ \AA}$)
- homogenní, ideálně povrchově zrelaxovaný fcc krystal niklu ($a_0 = 3,524 \text{ \AA}$)
- teplota 0 K

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.

Parametry simulace

- vícečasticový potenciál Finnisova-Sinclairova typu pro kovy
- skokové buzení v čase dle Heavisideovy funkce
- konstantní budící napětí $\sigma_A = 1,35$ GPa
- velikost simulačního kroku: 10^{-14} s
- simulace probíhala od kroku 0 do kroku 1200
- v každém simulačním kroku byla monitorována:
 - ★ celková energetická bilance
(kinetická energie, potenciální energie a práce vnějších sil)
 - ★ celkový počet interakcí jednotlivých atomů

Software a hardware

- původní program vytvořený v jazyce *Fortran 90*
- MPI-knihovna
- 30 procesorů
- *výpočetní cluster MINOS* Západočeské univerzity v Plzni:
 - ★ 16 dvouprocesorových uzlů AMD Athlon MP
 - ★ 1600 MHz
 - ★ 1 Gbyte operační paměti
 - ★ OS Debian GNU/Linux
- doba výpočtu jednoho simulačního kroku:
 - ★ \approx 83 sekund pro případ krychle
 - ★ \approx 90 sekund pro případ nekonečné desky

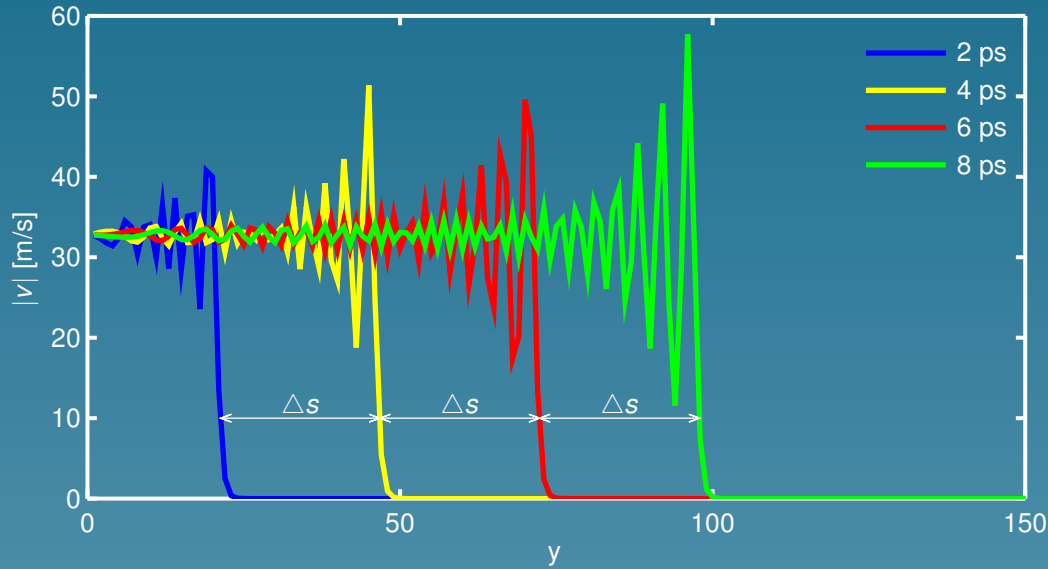
Elastické vlastnosti mědi a niklu při teplotě 0 K

	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

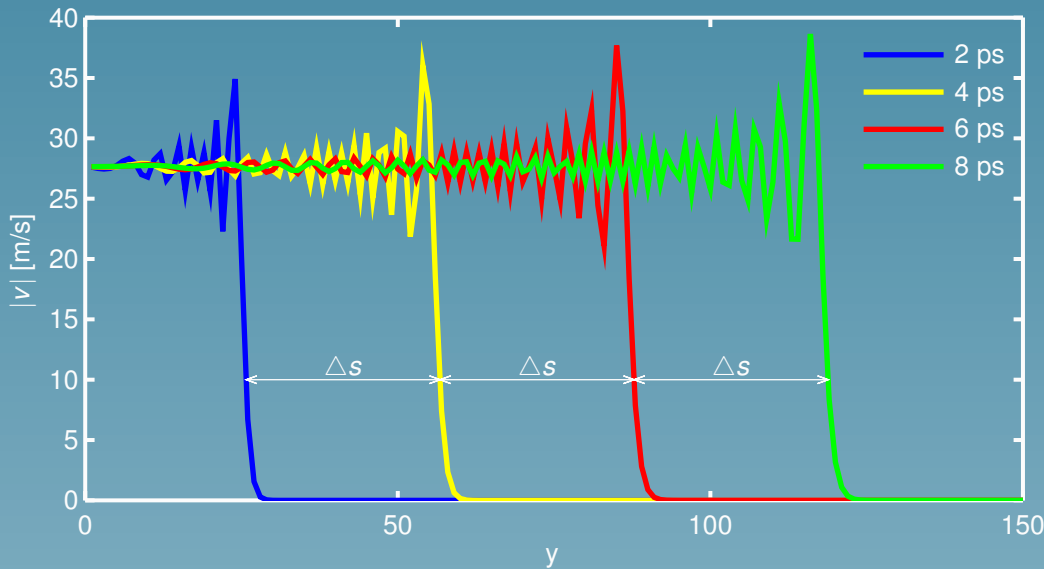
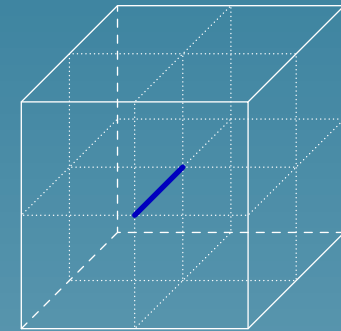


Rychlost	Cu			Ni		
	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
c_L [m s ⁻¹]	4341	4965	5156	5414	6156	6384
c_T [m s ⁻¹]	2905	1622	2137	3844	2489	3009
c_t [m s ⁻¹]	2905	2905	2137	3844	3844	3009

Rychlý celoplošný tlak na povrch nekonečné desky



Cu

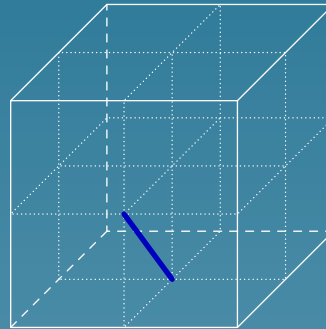


Ni

- Průběhy na předchozím obrázku lze použít pro stanovení rychlosti šíření podélné vlny ve směrech $\langle 100 \rangle$.
- Teoretická hodnota pro tyto směry uvedená v předchozí tabulce činí 4341 m/s pro měď a 5414 m/s pro nikl.
- Hodnota odečtená z grafu je přibližně 4433 m/s pro měď a 5291 m/s pro nikl.
- Tyto hodnoty se liší od hodnot předpokládaných cca o 2%, což je výsledek více než uspokojivý.

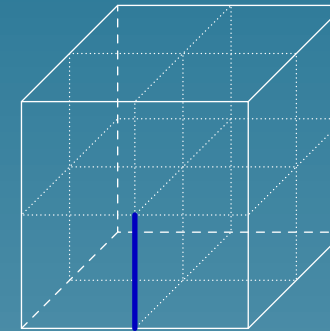
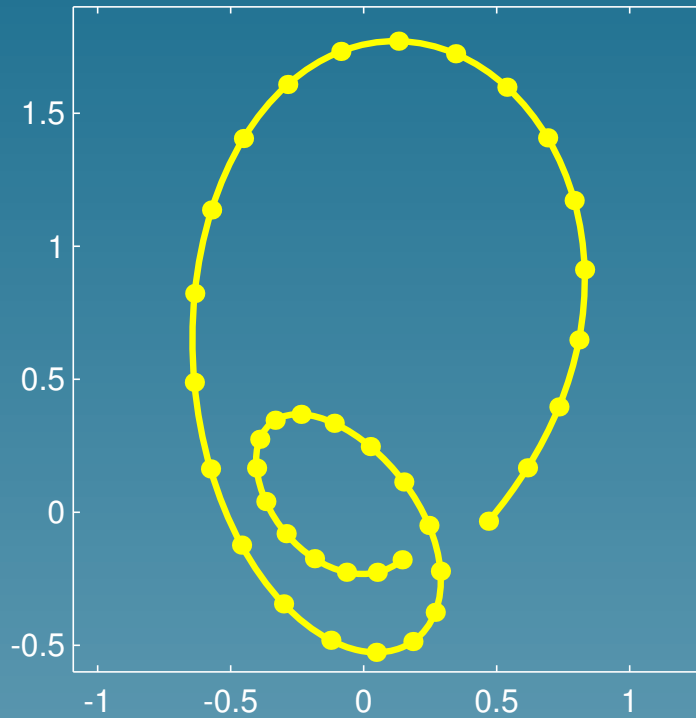
Rychlý lokální tlak uprostřed vnější stěny krychlového vzorku

Tuto simulaci lze využít například pro stanovení rychlostí šíření napěťových vln ve směrech $\langle 110 \rangle$.



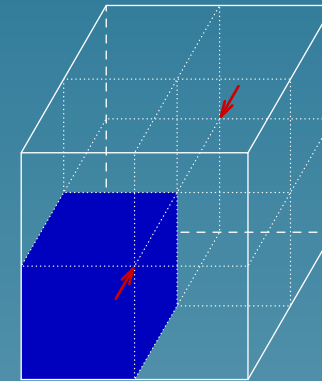
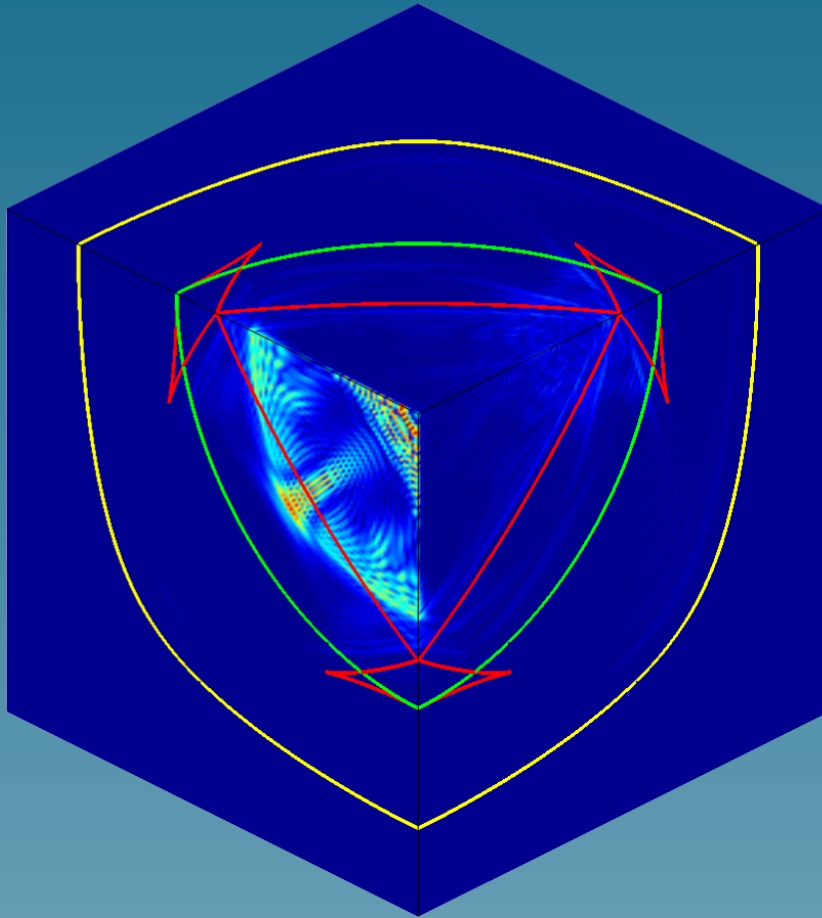
Rychlost	Cu			Ni		
	Teorie	Simulace	Chyba [%]	Teorie	Simulace	Chyba [%]
c_L [m s ⁻¹]	4965	5154	3,80	6156	6378	3,61
c_T [m s ⁻¹]	1622	1863	14,84	2489	2749	10,43
c_t [m s ⁻¹]	2905	2689	7,43	3844	3929	2,22

Průběh v_z versus v_y atomu na povrchu vzorku



- atom Ni na povrchu vzorku
- vzdálen $10a_0$ ve směru $[001]$ od buzení
- čas: 2,1 až 2,84 ps

Lokální tlak uprostřed vnější stěny v čase 8 ps



- krychlový vzorek Ni
- zobrazen modul rychlostí jednotlivých atomů
- zakreslena čela jednotlivých teoretických grupových rychlostí

Závěr

V literatuře jsou publikovány rovněž elastické konstanty pro stříbro a zlato. 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.

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.

OBSAH

Úvod

Popis simulací

Druhy testů

Parametry simulace

Software a hardware

Elastické vlastnosti mědi a niklu při teplotě 0 K

Rychlý celoplošný tlak na povrch nekonečné desky

Rychlý lokální tlak

uprostřed vnější stěny křehlového vzorku

Průběh v_z versus v_y atomu na povrchu vzorku

Lokální tlak uprostřed vnější stěny v čase 8 ps

Závěr