

THE CALIBRATION OF PIEZOELECTRIC TRANSDUCER.

A.V. Golovin, B.E. Kadlubovich, A.A. Kolbaenkov

Tomsk Polytechnic University

The paper offers method of calibration acoustical piezoelectric transducer. This measuring device used in investigations in the area of electron beams. The device works in the next way: high-energy electrons attain the front surface of the acoustic target (brass cylinder) and lose it's energy in the matter of the target. As a result local area of energy release appears there and because of thermal expansion shock wave appears in matter. Perturbation propagates in the matter of the target and influences on piezoelectric transducer. Oscillograph logs impulse of voltage. We need to have dependence between the voltage and pressure on back surface of the target. I this work we threw small steel ball on the front surface of the target from the fixed altitude. In this case we can describe all processes with sufficient accuracy and find the pressure on back surface of the target. In result we have theoretical dependence, which differs from experimental on 25-35 %.

УДК 548.4:539.1

ЗАРОЖДЕНИЕ ПОР В МЕТАЛЛАХ ПРИ РАДИАЦИОННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

В.Л. Орлов, А.Г. Малышкина, А.В. Орлов

Алтайский государственный технический университет

Облучение высокоэнергетическими частицами приводит к радиационному распуханию металлов и сплавов. При распухании в объеме материала образуются поры – результат распада системы избыточных вакансий, созданных излучением. Неустойчивость однородного пространственного распределения избыточных вакансий может быть вызвана полем упругих растягивающих напряжений, создаваемым самими вакансиями. В данной работе проведено компьютерное моделирование двумерного кристалла с целью определения устойчивости вакансионных кластеров и условий их самопроизвольного образования. Применен метод молекулярной динамики. Установлено, что искусственно созданные кластеры вакансий достаточно быстро рассасываются. Однородное пространственное распределение вакансий становится неустойчивым при превышении силами всестороннего растяжения кристаллической решетки некоторого критического значения. Таким образом, может считаться установленной физическая причина порообразования – действие упругих растягивающих напряжений.

Распухание металлических систем под действием облучения является одной из актуальнейших проблем радиационного материаловедения. С точки зрения теоретического описания основную сложность представляет начальный период возникновения кластеров вакансий - зародышей пор и их рост до критического размера. Многочисленные теоретические оценки показывают, что из-за неадекватности взаимодействия вакансий и междоузельных атомов с дислокациями в металлах при облучении возникает достаточно высокое вакансионное пресыщение. Радиационное порообразование естественным образом объясняется конденсацией пара избыточных вакансий. Трудность, однако, заключается в объяснении причины, по которой вакансионное пресыщение реализуется в виде пор, а не вакансионных петель. Основной моделью, призванной описать зарождение пор, является модель гомогенного зарождения, базирующаяся на общей термодинамической теории зарождения новой фазы. Другие модели, в которых вскрывается либо фактор стабилизации трехмерного вакансионного скопления (силы, препятствующие разрушению трехмерного вакансионного скопления до дислокационной петли), либо особая роль локального вакансионного пресыщения, вызванного структурными дефектами и каскадностью повреждения, представляются достаточно спорными.

В основе модели гомогенного зарождения пор лежит предположение о том, что зародыш возникает, если скорости захвата вакансионным кластером междоузлий и вакансий, т.е. потоки соответствующих точечных дефектов через плоскую единичную поверхность различны (поток вакансий превышает поток междоузлий). На первый взгляд предположение кажется самоочевидным для того, чтобы происходил рост пор (не выгодный с точки зрения чистой термодинамики), вакансии должны попадать на пору чаще, чем междоузельные атомы. Естественное возражение заключается в том, что рассасывание зародыша поры происходит главным образом не за счет поглощения междоузельных атомов, а за счет испускания порой вакансий. Этот процесс определяется большим значением поверхностной энергии поры и по определенным оценкам является доминирующим. По-видимому, следует признать модель гомогенного зарождения пор при радиационном воздействии явно неудовлетворительной.

В разработанной авторами модели зарождения пор при радиационном воздействии основными являются следующие положения:

Избыточная концентрация вакансий создает в объеме металла поле растягивающих упругих напряжений, компенсирующих поверхностную энергию кластера вакансий.

В поле упругих напряжений возникает неустойчивость, заключающаяся в том, что восходящая диффузия приводит к образованию вакансионных скоплений, размеры которых уменьшаются, а концентрация вакансий в них растет.

Образование зародыша пор из скоплений вакансий становится возможным вследствие компенсации сил поверхностного натяжения внешним полем растягивающих напряжений.

В системе растущих пор возникает упорядочение, т.е. появляется простой подход к теоретическому описанию сверхрешетки пор. Проведенные расчеты удовлетворительно согласуются с экспериментальными результатами.

Постановка задачи

В данной работе ставится задача проверки основных положений механизма образования и начального роста пор методом компьютерного эксперимента. При этом подходе возникает, по крайней мере, две трудности. Во-первых, для компьютерного моделирования реальной физической ситуации необходим образец достаточно больших размеров. Только тогда искусственно вводимые вакансии (приблизительно равномерно распределенные по объему) могут создавать достаточные для появления неустойчивости растягивающие упругие напряжения. Этой трудности можно избежать, если в компьютерном эксперименте вводить внешние усилия, создающие упругие напряжения, не связанные с вакансиями. Вторая трудность обусловлена громадным временем вычислений на ЭВМ в случае использования в модели трехмерной кристаллической решетки. Объем вычислений может быть существенно снижен в рамках модели двухмерной решетки, причем имеются все основания считать, что в этом случае основные качественные закономерности могут быть перенесены на трехмерную кристаллическую решетку.

Описание модели

Для изучения процессов зарождения пор была разработана компьютерная модель на языке Delphi, в основу которой положен метод молекулярной динамики, который заключается в решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений динамики Ньютона для описания движения атомов. Атомы рассматриваются как материальные точки, обладающие массой, находящиеся в поле сил межатомного взаимодействия. Для решения задачи были выбраны следующие условия:

В качестве объекта исследований использовалась двумерная решетка Ni. Межатомное взаимодействие аппроксимировалось парным потенциалом Морза.

$$\varphi(r) = D \cdot \beta \cdot e^{-\alpha r} \cdot (\beta \cdot e^{-\alpha r} - 2), \quad (1)$$

где r – расстояние между двумя атомами, D , β , α , r – константы в потенциале Морза для никеля.

Для каждого атома рассматривается окружение до четвертой координационной сферы. Потенциальная энергия системы представляется в виде

$$U = \frac{1}{2} \sum \varphi(r). \quad (2)$$

Математическим аппаратом описания движения атомов служит система уравнений Ньютона. Сила, действующая на атом, находится следующим образом

$$F = \frac{d\varphi}{dr}. \quad (3)$$

После дифференцирования получаем

$$F = -2 \cdot D \cdot \beta \cdot \alpha \cdot e^{-\alpha r} \cdot (\beta \cdot e^{-\alpha r} - 1). \quad (4)$$

Скорость атома вычисляется по формуле

$$V(t) = V(t - \Delta t) + \frac{F(t)\Delta t}{m}. \quad (5)$$

По скорости находим координату

$$X(t) = X(t - \Delta t) + V(t) \cdot \Delta t. \quad (6)$$

Для решения задачи Коши были выбраны следующие начальные условия:

$\Delta t = 10^{-14}$ с – шаг по времени.

Начальные координаты задаются соответственно гексагональной решетке. Известно, что в объеме никель имеет ГЦК-структуру, но двумерная решетка после релаксации принимает вид гексагональной решетки. Поэтому, чтобы сэкономить время вычисления, сразу задается гексагональная решетка.

$T_0 = 300$ К – начальная температура.

Начальные скорости вычисляются в зависимости от начальной температуры по формуле:

$$V_0 = \sqrt{\frac{4 \cdot k \cdot T_0}{m}}, \quad (7)$$

где k – коэффициент Больцмана, T_0 – начальная температура, m – масса атома.

Направления скоростей задаются псевдослучайным образом. Одной четвертой части атомов задается скорость, направленная вверх, одной четвертой – соответственно вниз, одной четвертой – вправо, одной четвертой – влево. Если выбирать направление скоростей случайным образом, то может получиться, что суммарный импульс системы направлен в одну какую-либо сторону, и при релаксации решетка начинает мигрировать в эту сторону.

Количество вакансий соответствует заданной концентрации. При проведении экспериментов мы задавали концентрацию 5 %, которая является неравновесной для данного материала при данной температуре. Расположение вакансий в кристалле выбирается случайным образом при каждом запуске программы.

Для оценки адекватности модели был проведен анализ распределения скоростей после релаксации решетки. В результате получено максвелловское распределение скоростей, что соответствует общепринятым представлениям и позволяет удостовериться в правильности полученных результатов.

Результаты

С помощью вышеописанной модели был проведен ряд вычислительных экспериментов. Разработанная модель позволяет наблюдать движение атомов в кристалле на экране компьютера.

В ходе экспериментов задавались различные конфигурации вакансий при различной их концентрации. Наблюдения показали, что при любой концентрации вакансий пора не может образоваться, пока нет растягивающих усилий. Вакансии мигрируют, частично поглощаются на границе, часть их объединяется в бивакансии, тривакансии, часть выстраивается в достаточно протяженные линейные дефекты, которые также мигрируют поглощая встречающиеся одиночные вакансии. В результате все вакансии рассасываются, и поры не образуются.

На рис. 1 представлена начальная конфигурация системы, соответствующая концентрации вакансий 5 %. После релаксации система приняла вид, показанный на рис. 2. Видно, что практически все вакансии вышли на поверхность.

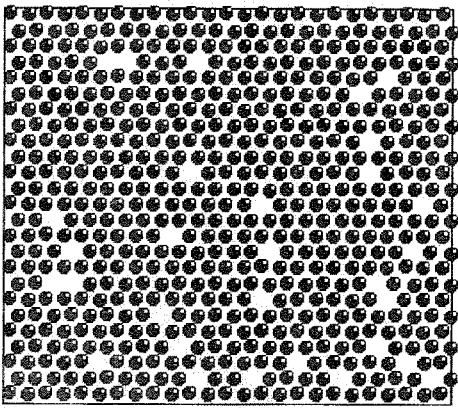


Рис. 1. Начальное состояние системы без воздействия растягивающих напряжений

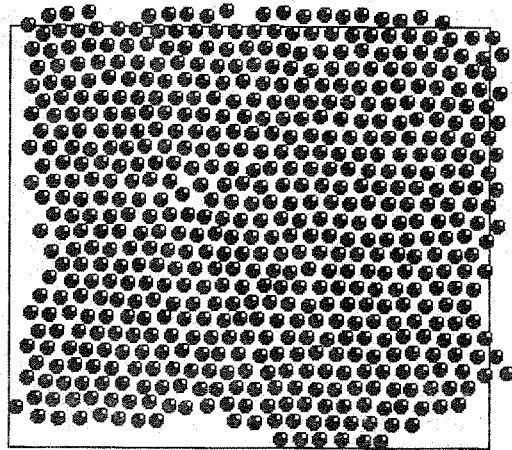


Рис. 2. Состояние системы после релаксации без воздействия растягивающих напряжений

Была искусственно создана пора, окруженная одиночными вакансиями в центре кристалла. В ходе релаксации вакансии, а также сама пора рассосались.

Если в предыдущем эксперименте к краям приложить сжимающие усилия, релаксация происходит быстрее, вакансии и пора рассасываются быстрее.

Но если к краям приложить растягивающие усилия, то картина меняется. Даже если изначально искусственно не создавать пору, а задать некоторую концентрацию вакансий (была задана концентрация 5 %), равномерно распределенных по кристаллу (рис. 3), в результате релаксации в кристалле образуются поры (рис. 4).

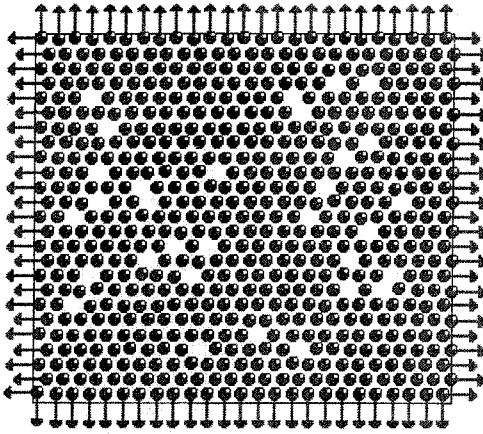


Рис. 3. Начальное состояние системы при наличии растягивающих усилий

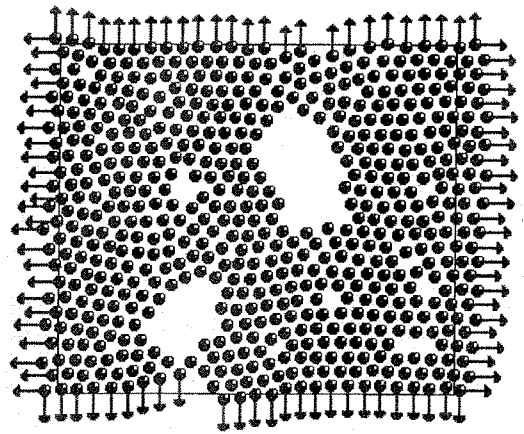


Рис. 4. Результат релаксации системы при наличии внешних растягивающих напряжений

Выводы

Полученные результаты компьютерного эксперимента на качественном уровне подтверждают основные черты механизма начальной стадии радиационного порообразования. Основные выводы работы могут быть сформулированы следующим образом:

Общепринятая теория квазитермодинамического зарождения новой фазы не пригодна для описания зародышей пор.

Без приложения внешних растягивающих напряжений искусственно созданные в решетке вакансии никогда не объединяются в кластеры, а выходят к стокам (здесь – к поверхности образца).

Без приложения внешних растягивающих напряжений искусственно созданная в решетке пора рассасывается путем испускания вакансий, стремящихся затем к стокам.

При приложении внешних растягивающих напряжений искусственно созданные в решетке вакансии объединяются в пору. Рассасывания поры не происходит.

При увеличении внешних растягивающих напряжений наблюдается самопроизвольное образование вакансий, объединяющихся затем в пору.

При увеличении температуры процессы ускоряются без качественного их изменения.

Литература

1. Ахиезер И.А., Давыдов Л.Н. Введение в теоретическую и радиационную физику металлов и сплавов. – Киев: Наук. Думка, 1985. 144с.
2. Евстигнеев В.В., Орлов В.Л., Орлов А.В., Тупицин Д.С // Вестник Алтайского научного центра Сибирской АН ВШ. 2000. №3. С. 3-8.
3. Дефекты в металлах и моделирование на ЭВМ: Сб. науч. трудов / Под ред. Ю.А. Осипьяна. – Л.: Наука, 1980. 216с.
4. Моделирование на ЭВМ дефектов в металлах: Сб. науч. трудов / Под ред. Ю.А. Осипьяна. – Л.: Наука, 1990. 224с.

Exposure to high energy particles leads to radiation expansion in metals and alloys. When a material expands pores are formed as a result of destruction of the system of excess vacancies that is created by radiation. Instability in homogeneous volume distribution of excess vacancies can be caused by the field of elastic dilatational strain created by the vacancies. Computer modeling of two-dimensional crystal is performed with the goal of Analyzing the stability of vacancy clusters and the conditions of their spontaneous formation. The method of molecular dynamics is applied. It is shown that artificially created vacancy clusters soon dissolve. Homogeneous volume distribution of vacancies becomes instable when the forces of uniform lateral crystal lattice dilatation increase above a certain value. Therefore the physical cause of pore formation can be defined as the effect of elastic dilatational strain.