

Твердофазный механизм ударно- волнового образования пылевых частиц тяжелых металлов

Э. Э. Лин, А. Л. Михайлов,
В. Н. Хворостин

Рассматривается возможность образования пылевых частиц в твердой фазе в результате ударно-волнового разрушения исходной кристаллической структуры материала и последующей коалесценции атомных кластеров (наночастиц), приводящей к агрегации мезокристаллических частиц (зерен) в ударно-сжатом слое.

Введение

Исследованию образования и выброса частиц металлов при выходе сильной ударной волны (УВ) на свободную поверхность образца (процессу пыления) посвящен ряд работ [1–6]. Зарегистрированы пылевые частицы размером от единиц до сотен микрометров. В этих работах образование пылевых облаков связывается с развитием неустойчивостей на шероховатостях поверхности металла, образованием жидкой фазы (плавление в волне разгрузки) и дробящихся струй.

В данной работе рассматривается возможность образования пылевых частиц в твердой фазе в результате ударно-волнового разрушения исходной кристаллической структуры материала. В этом плане определенный интерес представляет изучение возможности пыления тяжелых металлов при умеренном ударном воздействии, не приводящем к плавлению материала при выходе УВ на свободную поверхность. По всей видимости, исследуемый процесс протекает в две стадии: на первой стадии происходит повреждение и разрушение первичной кристаллической структуры вещества во фронте УВ на кластерном уровне и последующая коалесценция атомных кластеров (наночастиц), приводящая к образованию мезокристаллических частиц (зерен) в ударно-сжатом слое; вторая стадия – газодинамическая, когда происходит разрушение монолитного образца на внутризеренном уровне и по границам образовавшихся зерен и выброс материала со свободной поверхности под действием волны разгрузки, распространяющейся внутрь образца. За время ударного сжатия около 10^{-10} с [7] во фронте УВ возникают сотни интенсивных колебаний атомов вещества с характеристической частотой порядка 10^{12} с⁻¹. В результате множества колебаний происходят разрывы межатомных связей на дефектах структуры вещества и образование «обломков» исходной кристаллической решетки – атомных кластеров, являющихся зародышами будущих мезокристаллических частиц.

Методология

Рассмотрим твердофазные процессы агрегации в замкнутой системе объектов, взаимодействующих друг с другом случайным образом. Под замкнутой системой понимается исходный лагранжевый слой ударно-сжатого вещества (слой с постоянной массой). В основу рассмотрения положен асимптотический метод [8] исследования кинетики образования компактных объектов, проявляющих квантовые свойства. В данном случае это фононные возбуждения кристаллической решетки объектов – частиц металлов. В результате колебательных взаимодействий соприкасающихся объектов происходит взаимная компенсация незадействованных электронных связей атомов на внешних слоях и агрегация частиц. Эти твердофазные процессы протекают как в слабых, так и в сильных УВ.

При высоких температурах T вещества, превышающих дебаевский параметр θ_D , рост среднего размера $\langle a \rangle$ частиц кубической формы со временем t описывается следующим дифференциальным уравнением, полученным в [8]:

$$\frac{\langle a \rangle^{3/2}}{N^{1/2}} d\langle a \rangle = \left(\frac{3k_B T}{2Am_u n} \right)^{1/2} dt, \quad \langle a \rangle(t=0) = 0. \quad (1)$$

Здесь N – число атомов, охваченных фононными возбуждениями, k_B – постоянная Больцмана; T – температура; A – атомная масса, m_u – атомная единица массы, n – концентрация атомов. Уравнение (1) получено исходя из соотношений неопределенности *координата–импульс* в пространстве размеров a и *энергия–время*, которые в случае квантовой системы в когерентном состоянии (в данном случае – в приближении гармонических колебаний атомов с одинаковой частотой $\nu_D = k_B \theta_D / h$, h – постоянная Планка) выполняются в виде точных равенств, а траектория процесса в фазовом пространстве является классической. Определив зависимость $N\langle a \rangle$ для заданного режима процесса и решая уравнение (1) в квадратурах, можно получить приближительные законы роста среднего размера объектов со временем.

В предлагаемой модели зародышами образующихся мезокристаллических частиц могут быть наночастицы с критическим размером a_* , при котором в частице появляется квазидальний кристаллический порядок. При малом потоке (sf) зародышей, когда каждый из них успевает занять свое место на поверхности частицы до начала ее взаимодействия с последующей наночастицей, число возбужденных атомов равно $N = N_0 (a_*/a_0)^3$, где a_0 – характерный размер атомного кластера (зародыша кристаллической структуры), N_0 – число атомов в кластере. Тогда закон роста частиц имеет следующий вид:

$$\langle a \rangle_{sf} = \left(\frac{75k_B T a_*^3}{8Am_u} \right)^{1/5} t^{2/5} = \left(\frac{75k_B T a_c^3}{Am_u} \right)^{1/4} t^{2/5}. \quad (2)$$

Здесь из соображений трансляционной симметрии принято, что $a_* = 2a_c$, где a_c – размер кристаллической ячейки, принимаемый за размер атомного кластера.

При лобовом столкновении (fc) частиц параметр N в уравнении (1) равен числу атомов в канале, образуемом линейной цепочкой из элементарных кристаллических ячеек, уложенных на

длине $2\langle a \rangle$: $N = N_c 2\langle a \rangle / a_c$, где N_c – число атомов в ячейке, a_c – характерный размер ячейки. Тогда имеем следующее выражение для роста среднего размера $\langle a \rangle$:

$$\langle a \rangle_{fc} = \left(\frac{12k_B T a_c^2}{A m_u} \right)^{1/4} t^{1/2}. \quad (3)$$

Можно выделить два типа процессов на стадии твердофазной коалесценции: 1) режим *касательного взаимодействия* (трения) объектов (сдвиговый механизм – sm); 2) режим *одновременного (ударного) воздействия* (sa) во всем объеме системы. При касательном взаимодействии объектов число возбужденных атомов в прилегающих приповерхностных слоях с толщиной каждого слоя, равной характерному размеру кристаллической ячейки a_c , определим как $N = 2N_c (\langle a \rangle / a_c)^2$. В этом случае закон роста частиц имеет вид:

$$\langle a \rangle_{sm} = \left(\frac{27k_B T a_c}{4A m_u} \right)^{1/3} t^{2/3}. \quad (4)$$

В случае одновременного (ударного) возбуждения системы возбужденными оказываются все атомы двух взаимодействующих частиц: $N = 2N_c (\langle a \rangle / a_c)^3$. Из уравнения (1) получаем, что закон роста частиц имеет вид:

$$\langle a \rangle_{sa} = \left(\frac{3k_B T}{A m_u} \right)^{1/2} t. \quad (5)$$

Результаты и обсуждение

Для свинца с параметром гранцентрированной кубической решетки $a_c = 0,49496$ нм при $T = 300\text{--}500$ К ($\theta_D = 105$ К) и длительностях ударного воздействия $t = 10^{-9}\text{--}10^{-6}$ с из формул (2)–(5) получим диапазоны характерных размеров частиц, образующихся в ударно-сжатом веществе. При малом потоке зародышей (формула (2)) средние размеры частиц находятся в диапазоне от 10 нм до 0,17 мкм; при лобовом столкновении частиц (формула (3)) – в диапазоне от 14 нм до 0,5 мкм; при касательном взаимодействии (формула (4)) – от 30 нм до 4 мкм; при одновременном воздействии во всем объеме (формула (5)) – от 0,2 до 240 мкм. Аналогично для актиноида со стороной куба единичной кристаллической ячейки $a_c = 0,4637$ нм [9] при $T = 500\text{--}900$ К ($\theta_D = 100$ К), $t = 10^{-9}\text{--}10^{-6}$ с полный диапазон характерных размеров частиц, образующихся в ударно-сжатом веществе, составляет от 10 нм до 300 мкм.

Таким образом, при выходе слабой ударной волны на свободную поверхность макроскопических образцов тяжелых металлов с этой поверхности могут происходить выбросы частиц с характерными размерами от 10 нм до 300 мкм, образовавшихся в результате фононных возбуждений в ударно-сжатом веществе, приводящих к твердофазной коалесценции атомных кластеров и последующей агрегации мезокристаллических объектов. В случае же сильной УВ, когда происходит плавление металла в волне разгрузки, образовавшиеся в твердой фазе частицы с указанными размерами могут вылетать с поверхности образцов в виде жидких нано- и мезокапель.

Список литературы

1. Asay J. R., Mix L. P., Perry F. C. // Appl. Phys. Lett. 1976. Vol. 29, N 5. P. 284–287.
2. Огородников В. А., Иванов А. Г., Михайлов А. Л. и др. // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 6. С. 103–107.
3. Михайлов А. Л., Огородников В. А., Сасик В. С. и др. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2014. Т. 145. Вып. 5. С. 892–905.
4. Zellner M. B., Grover M., Hammerberg J. E. et al. // J. of Appl. Phys. 2007. Vol. 102. P. 013522.
5. Zellner M. B., Vogan McNeil W., Hammerberg J. E. et al. // J. of Appl. Phys. 2008. Vol. 103. P. 0123502.
6. Невмержицкий Н. В., Михайлов А. Л., Раевский В. А и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теор. и приклад. физика. 2010. Вып. 3. С. 3–6.
7. Бутягин П. Ю. Химическая физика твердого тела. – М.: Изд-во МГУ, 2006.
8. Lin E. E. // World Journal of Mechanics. 2014. Vol. 4, N 6. P. 170–194.
9. Плутоний. Фундаментальные проблемы / Пер. с англ. под ред. Б. А. Надыкто, Л. Ф. Тимофеевой. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003.

Solid Phase Mechanism of Shock Wave Formation of Dust Particles of Heavy Metals

E. E. Lin, A. L. Mikhaylov, V. N. Khvorostin

The possibility of formation of dust particles in solid as a result of shock-wave destruction of the initial crystalline material structure and subsequent coalescence of atomic clusters (nanoparticles), which leads to the aggregation of mesocrystalline particles (grains) in the shocked layer, is discussed.