03;11

Динамика распада перегретых состояний жидких металлов

© А.П. Кубышкин, Ф.Х. Мирзоев, В.Я. Панченко

Научно-исследовательский центр
по технологическим лазерам РАН, Шатура

Поступило в Редакцию 2 июня 1997 г.

Рассматривается кинетическая модель распада перегретого состояния жидких металлов, формируемого под воздействием наносекундного лазерного импульса. Показан экспоненциальный характер изменения температуры во времени и определено характерное время релаксации.

Изучение физических свойств веществ в метастабильных состояниях занимает особое место в проблеме фазовых превращений. Метастабильные состояния могут возникать при фазовых переходах I рода, таких как испарение, конденсация, кристаллизация и т. д. [1]. В метастабильном состоянии веществ претерпевают изменения такие термодинамические характеристики, как сжимаемость, теплоемкость, коэффициент теплового расширения [2], что может представлять интерес при разработке новых материалов. В настоящее время существующие источники лазерного излучения большой мощности и с варьируемыми временными параметрами импульса (вплоть до фемтосекундного масштаба) позволяют осуществлять воздействие на металлы, переводящие их в сильноперегретые (метастабильные) состояния [2], ранее не достижимые, с использованием традиционных методов [1]. В работе [3] была показана возможность перегрева ртути наносекундными лазерными импульсами в условиях механически нагруженной поверхности. Перевод в область метастабильности возможен при этом благодаря значительной динамической зависимости изменения температуры и давления в процессе действия лазерного импульса и после его прекращения. Как было показано экспериментально, для ртути распад перегретого состояния характеризуется экспоненциальной зависимостью изменения температуры от времени и характерное время релаксации: $\tau_T = 70\,\mathrm{ns}$.

Наиболее вероятным механизмом распада таких состояний в жидком металле является флуктуационное образование и рост зародышей конкурирующей фазы в слое перегретого металла. В данной работе рассматривается кинетическая модель распада перегретых метастабильных состояний, позволяющая исследовать поведение во времени температуры перегретых жидкостей, а также основных характеристик фазового перехода (скорость нуклеации, плотность зародышей).

Скорость нуклеации (J) зависит от степени перегрева $\theta = (T - T_0)/T_0$, которая изменяется со временем из-за поглощения скрытой теплоты фазового перехода (Q) при образовании зародышей новой фазы. Уравнение баланса тепла в этом случае можно записать в виде:

$$\theta = \frac{1}{\rho c T_0} \int_0^t S(t')dt' - \frac{4\pi Q}{3\rho c T_0 \Omega} \int_0^\infty r^3 f(r,t)dr, \qquad (1)$$

где ρ — плотность; c — теплоемкость; Ω — объем одной частицы; $f(r,t)$ — функция распределения устойчивых центров по радиусу r в момент времени t.

Функция $f(r,t)$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(Vf) = 0, \quad f(r,0) = 0, \quad f(r_0,t) = \frac{J(\theta(t))}{V(r)}(r = r_0), \qquad (2)$$

где $V(r) = dr/dt$ — скорость роста центров; r_0 — минимальный размер. Поскольку время установления стационарного распределения околокритических зародышей гораздо меньше характерного времени $\theta(t)$, то функция $J(t)$ квазистационарна, то есть определяется текущим значением перегрева $J(t) = J(\theta(t))$.

Скорость роста: $V = \mu\theta(t)/r^n$ [4], где n — показатель роста зародышей, μ — кинетический коэффициент ($\mu = 10^{-8}\,\mathrm{cm}^3/\mathrm{s}$) ($n = 0$ — если рост зародышей лимитируется кинетикой межфазных переходов; $n = 2$ — в случае преобладания механизма послойного роста).

Скорость нуклеации

$$J = N_1 B \exp(-U_c/kT), \qquad (3)$$

где N_1 — число частиц в единице объема метастабильной фазы; $U_c = 4\pi\gamma r_c^2/3$ — высота активационного барьера; $r_c = 2\gamma\Omega/Q\theta$ —

критический радиус; γ — поверхностное натяжение; $B = \Omega d\sqrt{\gamma kT}\exp(-W/kT)/2\pi r_c^2 h$ (h — постоянная Планка, W — энергия активации вязкого течения, d — межатомное расстояние) [4].

Из (1)–(3) имеем:

$$J(\theta) = J_0 \exp[-G(\theta)]. \tag{4}$$

Здесь: $J_0 = N_1 d(Q\theta)^2\sqrt{(1+\theta)kT_0}\exp[-W/kT_0(1+\theta)]/8\pi\gamma^{3/2}\Omega h$, $G(\theta) = 16\pi\gamma^3\Omega^2/3Q^2kT_0\theta^2(\theta+1)$.

Введем новые переменные $\zeta = \int\limits_{r_0}^{r} r^n dr$, $z(t) = \mu\int\limits_0^t \theta(t')dt'$. Тогда уравнение (2) можно представить в виде

$$\frac{\partial g}{\partial z} + \frac{\partial g}{\partial \zeta} = 0, \tag{5}$$

где $g(r) = f(r)/r^n$. Очевидно, что решение (5) зависит только от одной переменной, т. е.

$$g(r,t) = g(x) = g(z(t) - \zeta(t)), \quad g(x) - \frac{J(\theta(x))}{\mu\theta(x)}. \tag{6}$$

Здесь $\theta(x) \equiv \theta(t(x))$.

Следуя [5], разложим функцию в показателе экспоненты (4) в ряд Тейлора в окрестности начального перегрева θ_0: $G = G_0 + +G'(\theta_0)(\theta-\theta_0)+\ldots$. Пренебрегая зависимостью J_0 от θ по сравнению с очень сильной экспоненциальной зависимостью J от θ и учитывая, что в области зародышеобразования $G'(\theta_0)(\theta-\theta_0) < 1$, из (4) имеем:

$$g(x) \approx g_0 \exp[-\alpha\varepsilon(x)], \quad g_0 = J_0(\theta_0)(\mu\theta_0)^{-1}\exp[-G(\theta_0)], \tag{7}$$

где $\varepsilon = 1-\theta/\theta_0$ — относительное изменение перегрева; $\alpha = -\theta_0 G'(\theta_0)$.

Пусть перегрев создается мгновенно $S(t) = S_0\delta(t)$, $S_0 = \rho c T_0\theta_0$ (θ_0 — начальный перегрев), из (1) получаем:

$$\theta(t) = \theta_0\left(1 - \frac{4\pi Q}{3\rho c T_0\theta_0\Omega}\int\limits_0^\infty r^3 f(r,t)dr\right). \tag{8}$$

Подставляя в (8) выражение (7), получим уравнение динамики перегрева:

$$\varepsilon(z) = \beta \int_0^z (z-\xi)^m \exp[-\alpha\varepsilon(\xi)]d\xi,$$

$$\beta = 4\pi(n+1)^m Q J_0/3\mu\rho c\theta_0^2\Omega T_0, \quad m = 3/(n+1). \tag{9}$$

При выводе (9) полагалось, что заметный вклад в изменение перегрева вносят зародыши с размерами $r > r_0$.

После постановки $\varepsilon(z) = \alpha^{-1} Z_m(z/z_c)$, где $z_c = [(m+1)/\alpha\beta]^{1/(m+1)}$, из (9) имеем:

$$Z_m(z) = (m+1)\int_0^z (z-\xi)^m \exp[-Z_m(\xi)]d\xi. \tag{10}$$

Отсюда методом итераций, используя в качестве нулевого приближения $Z_m^0 = 0$, находим:

$$Z_m^{(1)} = z^{m+1}, \quad Z_m^{(2)} = (m+1)\int_0^z (z-\xi)^m \exp(-\xi^{m+1})d\xi \tag{11}$$

и т.д. Заметим, что итерации (11) достаточно быстро сходятся к единственному решению уравнения (10) и поэтому можно ограничиться первыми двумя итерациями.

Определим теперь функцию $z(t)$. С учетом определения $\varepsilon(z)$ для $z(t)$ имеем уравнение:

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\mu\theta_0}{\alpha}\left[\alpha - Z_m(z/z_0)\right].$$

Отсюда при малых временах имеем: $z(t) \approx \mu\theta_0 t$. При больших t, используя разложение $Z_m(z) \approx Z_m(z_0) + Z_m'(z_0)(z-z_0)$, где z_0 — решение уравнения $Z_m(z_0) = \alpha$, для $z(t)$ получаем: $z(t) = z_0[1 - \exp(-t/\tau_T)]$. Следовательно, для температуры перегрева, ограничиваясь для простоты первой итерацией для $Z_m^{(1)}$, имеем $\theta(t) = \theta_0 \exp(-t/\tau_T)$. Скорость нуклеации $J(t) = J_0 \exp(-t/\tau_N)^{m+1}$, где $\tau_T = \tau_N(\alpha^{1/(1+m)}/m)$, $\tau_N = [(m+1)/\alpha\beta]^{1/(1+m)}/\mu\theta_0$ — характерное время релаксации перегретого состояния, τ_N — длительность зародышеобразования. Таким

образом, показано, что температура перегретого жидкого металла экспоненциально релаксирует к равновесному значению. При характерных значениях параметров жидкой ртути $\rho = 14\,\mathrm{g/cm^3}$, $\Omega = 2.10^{-22}\,\mathrm{cm^3}$, $W = 10^{-13}\,\mathrm{erg}$, $\gamma = 0.5\,\mathrm{erg/cm^2}$, $J = 10^7\,\mathrm{cm^{-3}\cdot s^{-1}}$, $N = 4\cdot 10^{22}\,\mathrm{cm^3}$, $\alpha \sim 10^4$, $m = 1$ для характерного времени релаксации имеем $\tau_T \sim 80\,\mathrm{ns}$, что примерно соответствует данным эксперимента [3]. Заметим, что характерное время зародышеобразования составляет $\tau_N = 0.8\,\mathrm{ns}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант N 96-02-18988a).

Список литературы

[1] *Бойко В.Г., Могель Х.И., Сысоев В.М., Чалый А.В.* // УФН. 1990. Т. 161. С. 77.
[2] *Бункин Ф.В., Трибельский А.М.* // УФН. 1980. Т. 130. С. 193.
[3] *Карабутов А.А., Кубышкин А.П., Панченко В.Я., Подымова П.Б.* // Кв. электроника. 1995. Т. 22. С. 820.
[4] *Скрипов В.П.* Метастабильная жидкость. М.: Наука, 1972. 312 с.
[5] *Мирзоев Ф.Х., Решетняк С.А., Фетисов Е.П., Шелепин Л.А.* Препринт МИФИ. 017-86. М., 1986.