

01;05.3

Твердофазный механизм ударно-волнового образования пылевых частиц тяжелых металлов

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

Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Институт физики взрыва, Саров
E-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

Поступило в Редакцию 21 марта 2016 г.

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.

Ряд работ посвящен исследованию образования и выброса частиц металлов при выходе сильной ударной волны (УВ) на свободную поверхность образца (процесс пыления) [1–6]. Зарегистрированы пылевые частицы с размерами от единиц до сотен микрометров. В этих работах образование пылевых облаков связывается с развитием неустойчивостей на шероховатостях поверхности металла, с 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 рассмотрение 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: 1 — стадия, на которой происходят 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 удар-

но-сжатом слое; 2 — газодинамическая стадия, на которой 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 возбуждаются и происходят 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.

В данной работе рассматриваются 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 — атомный вес, 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:

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

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 $\langle a \rangle$:

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

Можно выделить также 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 следующий 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 следующий вид:

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

Для свинца с параметром гранцентрированной кубической решетки $a_c = 0.49496 \text{ nm}$ при $T = 300\text{--}500 \text{ K}$ ($\theta_D = 105 \text{ K}$) и длительностях ударного воздействия $t = 10^{-9}\text{--}10^{-6} \text{ s}$ из формул (2)–(5) получаем диапазоны величин характерных размеров частиц, образующихся в ударно-сжатом веществе. При малом потоке зародышей (формула (2)) средние размеры частиц лежат в диапазоне от 10 nm до $1.7 \mu\text{m}$; при лобовом столкновении частиц (формула (3)) — от 14 nm до $0.5 \mu\text{m}$; при касательном взаимодействии (формула (4)) — от 30 nm до $4 \mu\text{m}$; при одновременном воздействии во всем объеме (формула (5)) — от 0.2 до $240 \mu\text{m}$. Аналогично для актиноида со стороной куба единичной кристаллической ячейки $a_c = 0.4637 \text{ nm}$ [9] при $T = 500\text{--}900 \text{ K}$ ($\theta_D = 100 \text{ K}$), $t = 10^{-9}\text{--}10^{-6} \text{ s}$ полный диапазон величин характерных размеров частиц, образующихся в ударно-сжатом веществе, составляет от 10 nm до $300 \mu\text{m}$.

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 nm до $300 \mu\text{m}$, 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. V. 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. // ЖЭТФ. 2014. Т. 145. В. 5. С. 892–905.
- [4] *Zellner M.B., Grover M., Hammerberg J.E.* et al. // J. Appl. Phys. 2007. V. 102. P. 013 522.
- [5] *Zellner M.B., Vogan McNeil W., Hammerberg J.E.* et al. // J. Appl. Phys. 2008. V. 103. P. 0123 502.
- [6] *Невмержицкий Н.В., Михайлов А.Л., Раевский В.А.* и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2010. В. 3. С. 3–6.
- [7] *Бутягин П.Ю.* Химическая физика твердого тела. М.: Изд-во МГУ, 2006. 272 с.
- [8] *Lin E.E.* // World J. Mechanics. 2014. V. 4. N 6. P. 170–194.
- [9] Плутоний. Фундаментальные проблемы. В 2-х томах. / Пер. с английского под ред. Б.А. Надыкто, Л.Ф. Тимофеевой. Саров: Изд-во ФГУП „РФЯЦ-ВНИИЭФ“, 2003. 495 с. (Challenges in Plutonium Science. Los Alamos Science, 2000. Number 26).