

05:08:09

Моделирование ударной генерации гиперзвуковых фононов и резонансный принцип активации компактирования нанопорошков

© В.В. Покропивный, В.В. Скороход, А.В. Покропивный,
Ю.Г. Красников

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича
НАН Украины, Киев
Московский физико-технический институт,
Долгопрудный

Поступило в Редакцию 24 января 1997 г.

Методом компьютерного моделирования изучен эффект генерации вынужденных гиперзвуковых фоновых колебаний в момент удара α -Fe наночастиц. Предложен принцип резонансного усиления этих колебаний и активации компактирования наночастиц с помощью селективного ультразвукового/гиперзвукового воздействия или инфракрасного/микроволнового излучения, синхронного с ударом.

Известно, что механическая, ультразвуковая и микроволновая обработка активирует спекание порошков. При механической активации в шаровых мельницах энергия деформации превращается в энергию поверхностных дефектов и упругую энергию, возврат которой при спекании способствует локальному разогреву, аккомодации и соединению поверхностей. В последнее время усиленно развиваются взрывные технологии компактирования ультрадисперсных сверхтвердых частиц и, в частности, алмазных порошков [1,2]. Считается, что соединение частиц в этих случаях происходит по механизму плавления поверхностей. Согласно теореме Кенига после неупругого столкновения частиц в отсутствие внешних сил относительное движение частей системы прекращается, т. е. обе частицы движутся как одно целое, а часть кинетической энергии превращается во внутреннюю энергию. В реальном случае на частицы действуют как внешняя сила деформации, так и знакопеременная сила адгезии, зависящая от толщины зазора между

частицами. Это должно вызвать вынужденные колебания обеих частиц. Телен [3] теоретически показал, что баланс между поверхностной и упругой энергией вызывает продольные высокочастотные колебания двух контактирующих малых частиц с частотой $\omega = (3ES/m)^{1/2}$, где E — модуль Юнга, S — радиус контакта, m — масса частиц. Это акустические фононные колебания, лежащие в диапазоне $0 \leq \omega \leq \omega_D$, где ω_D — частота Дебая, равная 7.77 ТГц для Fe и 38.75 ТГц для алмаза. Частота колебаний частиц Ni размером 30 нм равна $\omega = 5.7$ ТГц. Однако из-за шероховатости поверхностей исходных частиц реальная площадь контакта частиц неопределенна, поэтому рассчитать частоту таким способом практически невозможно. Подобные высокочастотные колебания острия возникают и в атомно-силовом микроскопе [4]. В.Ф. Анисичкин впервые обратил внимание на явление резонансной твердофазной коалесценции малых частиц алмаза при взрыве [5]. Он качественно рассчитал "магические" размеры частиц, при которых на кривой распределения частиц по размерам в продуктах взрыва наблюдаются провалы и максимумы. Однако механизм резонансного лавинообразного соединения решеток не установлен.

В данной работе методом компьютерного моделирования изучен эффект генерации вынужденных акустических гиперзвуковых фононных колебаний при ударе α -Fe-наночастиц и обоснован резонансный принцип ультрагиперзвукового и комплексного ударно-микроволнового компактирования нанопорошков.

Для моделирования неупругого удара наночастиц методом молекулярной динамики применялся комплекс программ СИДЕМ/АСМИТ [6]. Использовались гибкие граничные условия, что соответствует столкновению свободных наночастиц. Частица-пуля имеет форму куба или конуса, а частица-мишень — форму куба. Изображение плоского сечения структуры частиц выводилось программой визуализации на экран компьютера и показано на рис. 1. Там же представлены и функции радиального распределения, показывающие относительное число парных межатомных связей в зависимости от длины связей. Использовался режим поочередного удара и релаксации — после завершения релаксации все атомы частицы-пули смещаются по нормали к частице-мишени с шагом $\Delta y = 0.01$ Å ($A = 0.28665$ нм — постоянная решетки α -Fe) и начальной скоростью $v \propto 1430$ м/с. На каждом n -м шаге рассчитывалось смещение центра масс пули Δy_{c1} и мишени Δy_{c2} вдоль y -оси удара, а также сумма среднеквадратических смещений всех атомов

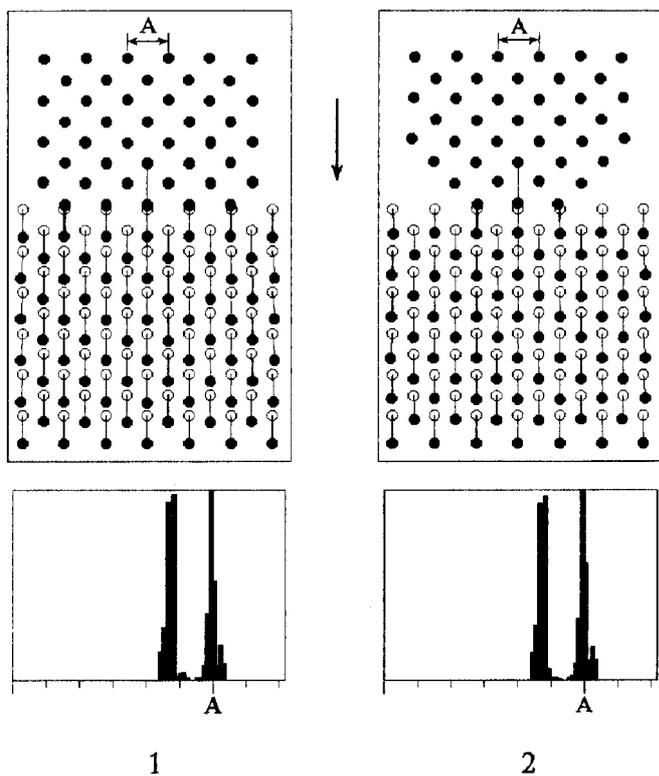


Рис. 1. Конфигурация, атомные смещения и функция радиального распределения верхней частицы-пули и нижней частицы-мишени в момент удара. Темными кружками показаны атомы плоского среза по плоскостям (100). Светлый кружок под темным — стартовое положение атома до релаксации. Линии, соединяющие атомы, — адгезионные связи между обеими частицами. Стрелка указывает направление удара.

кристаллита $\bar{u} = \sum \sqrt{\bar{u}^2}$. Межатомные взаимодействия рассчитывались с помощью короткодействующего поверхностного нелокального потенциала $\varphi(r)$ [7]. Суммируя парные связи между частицей-пулей i и мишенью j рассчитывали силу адгезии $F_a = -\sum d\varphi(r_{ij})/dr_{ij}$. Изменение численных характеристик показано на рис. 2. Для расчета

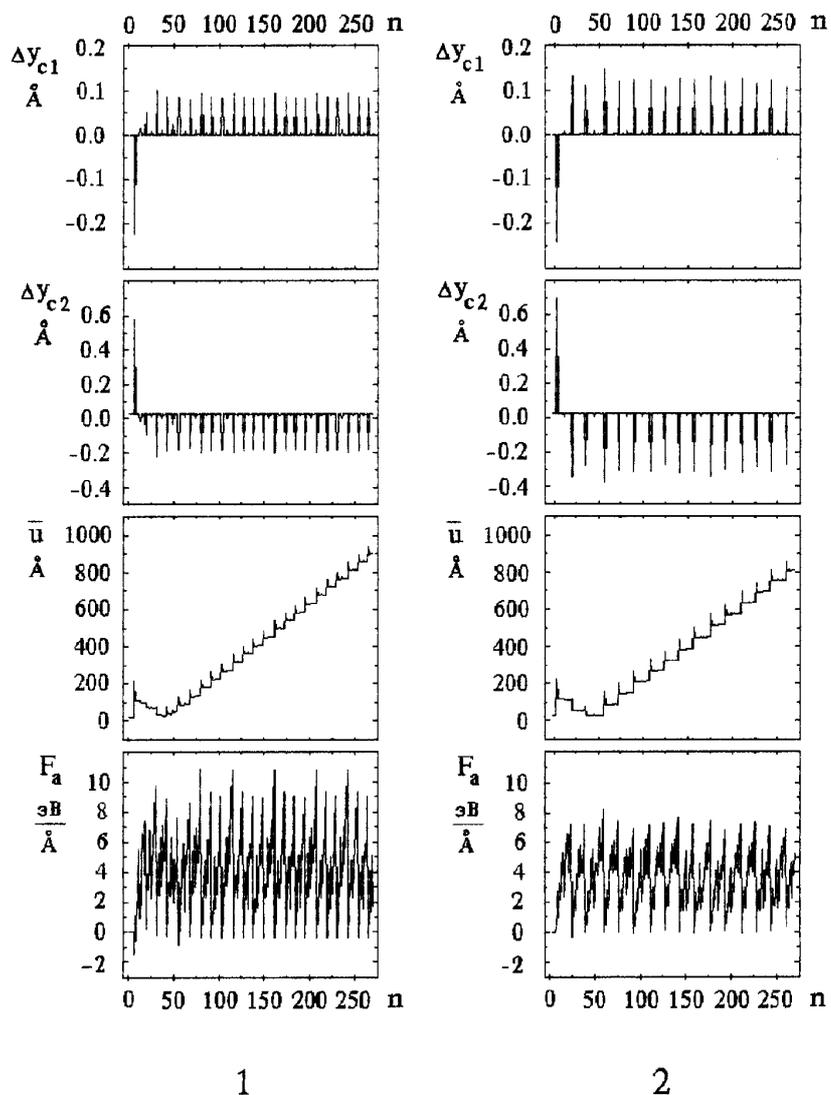


Рис. 2. Колебание центра масс пули Δy_{c1} и мишени Δy_{c2} , суммы средне-квадратических смещений всех атомов u и силы адгезии F_a на n -м шаге удара ($1\text{\AA} = 10^{-10}\text{ м}$, $1\text{эВ}/\text{\AA} = 1.602\text{ нН}$).

вынужденных колебаний наночастиц впервые применен спектрально-временной анализ с использованием пакета компьютерных программ VRN [8]. Рассчитывалась спектрально-временная диаграмма ("сван"), показывающая частоты ω и относительные амплитуды фурье спектра колебаний в каждый момент времени t , а также усредненный по времени амплитудный спектр, показывающий усредненную плотность фононных колебаний $g(\omega)$ (рис. 3). Фактически это новый способ компьютерного вычисления фононного спектра. Для выявления зависимости частоты от массы проведены два эксперимента: в первом пуля и мишень содержали 192 и 474 атома, а во втором — 178 и 280 соответственно.

Результаты моделирования представлены на рис. 1–3, на которых цифры 1 и 2 соответствуют первому и второму компьютерному эксперименту соответственно. До удара внешние поверхностные слои релаксируют вовнутрь [7]. В первый момент взаимодействия атомы первого, второго, третьего и четвертого поверхностного слоя обеих частиц смещаются так резко навстречу друг другу, что показывают большие скачки суммарных смещений и смещений центров масс частиц на рис. 2. Это известное явление когезионного обвала [9–11]. Примечательно, что после небольшого переходного периода хаотические колебания переходят в строго периодические (рис. 2). Возникает устойчивое колебательно-поступательное движение обеих частиц как единого целого, которое может длиться бесконечно долго за счет внешней энергии ударных импульсов. Первая координационная сфера на функции радиального распределения расщепляется. Заметим, что тот же эффект генерации вынужденных механических колебаний возникает и при смене направления внешнего импульса, т. е. при ударном растяжении. Заметим также, что импульс от пули передается частице-мишени во втором эксперименте через сравнительно узкий адгезионный контакт. Следовательно, наночастицы передают давление через контакт подобно жидкости в соответствии с законом Паскаля.

На рис. 3 показаны спектрально-временная диаграмма и спектр колебаний центра масс частицы мишени. По сравнению со спектром свободных колебаний идеальной решетки в теории Дебая, в фононном спектре вынужденных колебаний на общем фоне выделяется ряд пиков кратных частот. В первом эксперименте эти частоты равны $\omega_k \simeq 0.9$ ТГц ($k = 1, 2, 3, 4, 5$), причем пик $k = 3$ расщеплен, а во втором — $\omega_k \simeq 0.6$ ТГц ($k = 1–8$), причем пики $k = 4–8$ расщеплены. Частота этих колебаний попадает в гиперзвуковой диапазон и лежит ниже

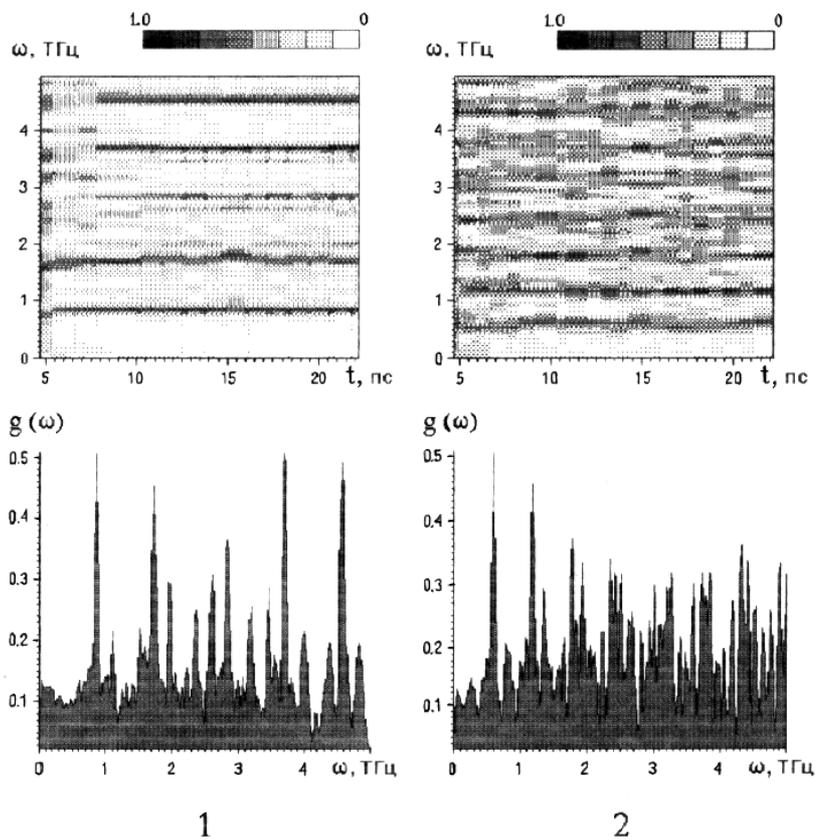


Рис. 3. Спектрально-временная диаграмма и фоновый спектр вынужденных колебаний центра масс частицы-мишени. На "сван"-диаграмме большая зачерненность соответствует большей амплитуде спектра в относительных единицах. Продолжительность зачерненных полос соответствует устойчивым колебательным модам.

частоты Дебая ω_D . Следовательно, это вынужденные акустические фоновые колебания. Заметим, что подобные колебания выглядят как поверхностные, поэтому они ошибочно воспринимаются как плавление поверхностей. Частота колебаний определяется типом материала, размером частиц и в нашем случае попадает в гиперзвуковой диапазон.

Эта частота, с одной стороны, должна уменьшаться как $\omega_k \propto 1/m^{1/2}$ при увеличении размера (массы) частиц (дисперсности порошков), а с другой — увеличиваться при возрастании реальной площади контакта частиц как $\omega_k \propto S^{1/2}$. Привязавшись к первой гармонике $\omega_0 \simeq 900$ ГГц для кубических частиц с ребром $d_0 \simeq 6$ А, можно получить аппроксимирующее соотношение для зависимости частоты от размера частиц $\omega \simeq \omega_0 (d_0/d)^{3/2}$. Из него следует, что для α -Fe-частиц размером $d \geq 100$ нм частота колебаний уменьшается и попадет в ультразвуковой диапазон $\omega \leq 1$ ГГц.

Эффект ударной генерации фононов можно использовать для активации динамического компактирования ультрадисперсных порошков. Действительно, гиперзвуковая или ультразвуковая обработка увеличит амплитуду колебаний. Подобная раскачка частиц приведет к уменьшению эффективной толщины зазора между ними, способствуя образованию межзеренных межатомных адгезионных связей. После схватывания связи усиливаются самопроизвольно и возникает прочный адгезионный контакт. Этот эффект наиболее выражен при резонансном условии, когда частота внешнего ультразвукового/гиперзвукового воздействия ω_s совпадает с частотой вынужденных динамических колебаний частиц $\omega_s = \omega_k$. В случае безударного нединамического ультразвукового воздействия его частота должна совпадать с частотой собственных нормальных колебаний частиц, зависящей от их размера, $\omega_s = \omega_n(d)$.

Подобный эффект может иметь место и при электромагнитном облучении. Учитывая способность диэлектрических материалов рассеивать и поглощать электромагнитное излучение, можно предположить, что в момент удара порошковая прессовка представляет собой временную диссипативную структуру, способную к резонансному поглощению в инфракрасной или микроволновой области. При этом резонансная частота ω_e диктуется соотношением Мандельштама–Бриллюэна, $\omega_e = \omega_k c' / 2v_s \sin(\theta/2)$, где c' и v_s — скорость света и звука соответственно, θ — угол рассеяния. Как показано Таунсом и другими [12], вследствие электрострикции возможно вынужденное рассеяние Мандельштама–Бриллюэна и когерентная генерация гиперзвуковых волн. Поэтому селективное лазерное или магнетронное облучение, синхронное с ударным воздействием, будет способствовать увеличению амплитуды колебаний частиц, уменьшению эффективной толщины зазора и, в конечном итоге, активации динамического компактирования порошков. В качестве источников могут применяться

различные приборы — от газовых лазеров для наночастиц размером $\propto 10$ нм, до магнетронов для частиц $\propto 1$ мкм и генераторов радиоволн для частиц $\propto 1$ мм. Практическая реализация этого принципа требует дальнейших систематических исследований.

Список литературы

- [1] Бацанов С.С., Вазюлин В.А., Копанева Л.И. и др. // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27. N 4. С. 139.
- [2] Лин Э.Э., Новиков С.А., Куропаткин В.Г. и др. // Физика горения и взрыва. 1995. Т. 31. N 5. С. 136–138.
- [3] Thölen A.R. // Fundamentals of friction: Macroscopic and microscopic processes / Eds: I.L. Singer, H.M. Pollock, Kluwer Academic Publisher, 1992. P. 95–110.
- [4] Kolosov O., Yamataka K. // Jpn. J. Appl. Phys. 1993. V. 32. P. L1095.
- [5] Анисичкин В.Ф. // Химическая физика. 1993. Т. 12. № 5. С. 605—608.
- [6] Покропивный В.В., Скороход В.В. // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 9. С. 70–77.
- [7] Покропивный В.В. // Металлофизика. 1996. Т. 18. № 2. С. 38–43.
- [8] Атлас временных вариаций природных процессов. Порядок и хаос в литосфере и др. сферах. Т. 1. // А.Г. Гамбургцев, С.И. Александров, А.С. Беляков и др. М.: ОИФЗ РАН, 1994. 176 с.
- [9] Smith J.R., Bozzolo G., Banerjara A., Ferrante J. // Phys. Rev. Letters. 1989. V. 63. P. 1269.
- [10] Nelson J.S., Dodson B.W., Taylor P.A. // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 4439.
- [11] Pethica L.P., Sutton A.P., Sutton A.P. // J. Vac. Sci. Technol. 1988. V. A6. P. 2490.
- [12] Chiao R.Y., Townes C.H., Stoicheff B.P. // Phys. Rev. Lett. 1964. V. 12. P. 592.