

УДК 539.21

*К. П. Зольников, А. В. Абдрашитов, Д. С. Крыжевич, С. Г. Псахье*

### **Моделирование электрического взрыва металлических проволок\***

*K. P. Zolnikov, A. V. Abdrashitov, D. S. Kryzhevich, S. G. Psakhie*

### **Simulation of Metal Wire Explosion by Electric Pulse Loading**

На основе метода молекулярной динамики проведено моделирование особенностей взрывного разрушения металлических проволок при электрическом воздействии. Межатомное взаимодействие рассчитано в рамках метода погруженного атома. В качестве исследуемого образца использованы поликристаллы меди цилиндрической формы. Разогрев моделируемого кристаллита, связанный с генерацией в нем тока высокой плотности, осуществлен масштабированием атомных скоростей. Показано, что в результате высокоскоростного разогрева моделируемый образец разрушается с образованием газовой фазы и кластеров различного размера. Поведение моделируемой системы при взрыве определяется конкуренцией таких процессов, как разрушение и объединение кластеров; испарение атомов с поверхности кластеров; столкновение кластеров друг с другом и осаждение на них атомов газовой фазы. Обнаружено, что межзеренные области оказывают существенное влияние на процессы разрушения и формирование кластеров с внутренней блочной структурой. Это связано с существенно неоднородным распределением плотности тока (температуры) по сечению образца на стадии высокоскоростного разогрева.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, металлическая проволока, диспергирование, атомная структура, кластеры.

DOI 10.14258/izvasu(2014)1.1-43

Свойства нанопорошков металлов, сплавов и керамических материалов определяются не только размерами получаемых нанопорошинок, но и степенью их активированности, а также особенностями их внутренней структуры [1–3]. Одной из перспективных технологий синтеза наночастиц заданного композиционного состава с блочной внутренней структурой является электротепловое импульсное диспергирование проводников. Данная технология позволяет получать композиционные наночастицы, состоящие из кристаллитов нескольких металлических или неметалличе-

Peculiarities of metal wire explosion by high voltage loading are investigated. Embedded atom method is employed to calculate atomic interaction. In this work, cylindrical specimens of polycrystalline copper are examined. High-rate heating of specimens induced by high-density electric current is simulated by scaling the velocities of atoms. It is demonstrated that simulated specimen destruction caused by high-rate heating leads to formation of vapor phase and clusters of various sizes. Simulated system behavior during explosion is determined by processes of destruction and cluster agglomeration, surface atom evaporation, cluster collision, and atom deposition on clusters free surfaces. Influence of the grain boundary region on processes of destruction and formation of clusters with internal block structures is revealed. It is proved to be the case of nonuniform distribution of electric current density (temperature) on the stage of high-rate heating.

**Key words:** molecular dynamics, metal wires, dispersion, atomic structures, clusters.

ских фаз, что придает им дополнительные новые свойства [4]. Вследствие быстротечности исследуемого процесса и малости характерных пространственных масштабов, на которых происходит формирование наночастиц, экспериментальное изучение динамики разрушения и синтеза наноразмерных частиц затруднено. Эффективным подходом для изучения физических явлений при высокоскоростном разрушении образцов является компьютерное моделирование [5, 6]. В настоящей работе исследуется влияние границ раздела на особенности диспергирования металличе-

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Фундаментальные основы технологий наноструктур и наноматериалов» (проект №24.64).

ских проволок при электротепловом взрыве в рамках компьютерного моделирования.

Изучение процесса диспергирования проводилось на основе метода молекулярной динамики. Для описания межатомного взаимодействия использовались потенциалы, рассчитанные в рамках метода погруженного атома [7, 8]. Используемые потенциалы позволяют с хорошей точностью описывать поверхностные свойства, энергетику дефектов структуры, упругие характеристики и ряд других свойств, которые важны для моделирования процесса диспергирования. В качестве исследуемого образца использовались поликристаллы меди цилиндрической формы. Моделируемый образец содержал около 40000 атомов, высота цилиндрического образца составляла примерно 30 параметров решетки, а диаметр — 20. Пространственное распределение температуры при тепловом воздействии задавалось двумя способами. В первом способе температура образца увеличивалась по линейному закону в направлении от оси цилиндра к боковым поверхностям, а во втором — от боковой поверхности к оси. В процессе теплового воздействия отличие температур в центре и на боковых поверхностях составляло 25%. При этом максимальная температура разогрева образца достигалась за время, равное 0,1 пс. Разогрев кристаллита осуществлялся масштабированием атомных скоростей по линейному закону с сохранением распределения Максвелла. Для обоих способов нагрева характер изменения межатомного расстояния в нагружаемом кристаллите качественно совпадает. По результатам расчета можно выделить две характерные стадии поведения моделируемого образца. На первой стадии, длительность которой составляет примерно одна пикосекунда, среднее межатомное расстояние без нарушения сплошности образца быстро увеличивается до максимального. Среднее расстояние между атомами в кристаллите через пикосекунду увеличивается по сравнению с исходным межатомным расстоянием примерно на 3,0%, причем для второго способа оно несколько меньше. Такое увеличение параметра решетки соответствует скачку объема, равному примерно 9%, что значительно больше скачка объема при плавлении.

На второй стадии аккомодация образца осуществляется за счет его разрушения с образованием кластеров и газообразной фазы. Процесс разрушения проводника и образование кластеров сопровождаются достаточно быстрым уменьшением межатомного расстояния в кластерах, поскольку кинетическая температура атомов в кластерах начинает быстро понижаться. Уменьшение кинетической температуры образца обусловлено возникновением процесса разрушения. В последующем на этапе эволюции разрушение и объединение кластеров определяются такими процессами, как дальнейшее разрушение кластеров, если их внутренняя кинетическая энергия превосходит

энергию образования дополнительной свободной поверхности; испарение атомов с поверхности кластеров; столкновение с другими кластерами и атомами газовой фазы. Расчеты показали, что температура кластеров на второй стадии меняется в широких пределах. При этом если крупные кластеры имеют близкую температуру, то температура кластеров небольшого размера варьируется в широком диапазоне.

Результаты моделирования показывают, что при определенных режимах электротеплового нагружения образцов межзеренные области могут оказывать существенное влияние на процессы формирования кластеров с внутренней блочной структурой. Это связано с неоднородностью плотности тока по сечению образца, что приводит к неоднородному распределению температуры нагрева. Известно, что межзеренные границы начинают плавиться при более низких температурах, чем зерна. Оплавленные области (межзеренные границы) обладают более высоким значением электросопротивления, чем кристаллические участки, а значит, они будут иметь более высокую температуру на стадии нагрева. Структура моделируемого кристаллита с межзеренными границами приведена на рисунке 1. При разогреве такого кристаллита температура межзеренных областей задавалась на 20% выше, чем температура в объеме зерен.

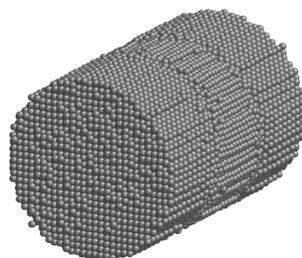


Рис. 1. Структура кристаллита меди с межзеренными границами

Изменение температуры в процессе взрыва и последующей эволюции проволок с идеальной структурой и с границами зерен показано на рисунке 2. Из рисунка видно, что изменение температуры кристаллита с межзеренными границами в процессе разрушения достаточно сильно отличается от соответствующего поведения исходно монокристаллического образца (для образца с границами зерен кривая имеет большее число скачков). Анализ результатов расчета показал, что скачки на кривых связаны с разрушением крупных кластеров. Из сравнения рисунка 3а и б видно, что на последней гистограмме исчез (распался) самый большой кластер, состоявший

примерно из 12 000 атомов, что привело к скачку кривой на рисунке 2 на соответствующем временном интервале.

Анализ числа атомов, не входящих в кластеры, показал, что число таких атомов со временем растет. Это может быть обусловлено как испарением атомов с поверхности кластеров, так и разрушением кластеров при их соударении. Возрастание числа свободных атомов свидетельствует о том, что интенсивность процесса испарения существенно выше процесса осаждения. Как и следовало ожидать, увеличение температуры нагрева образца приводит к увеличению числа свободных атомов.

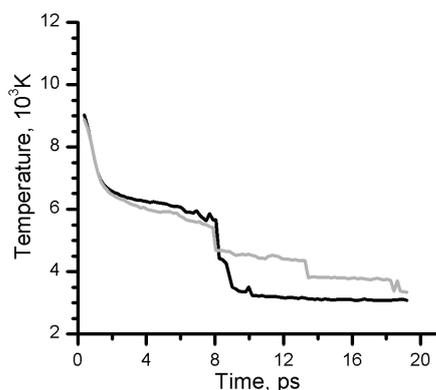
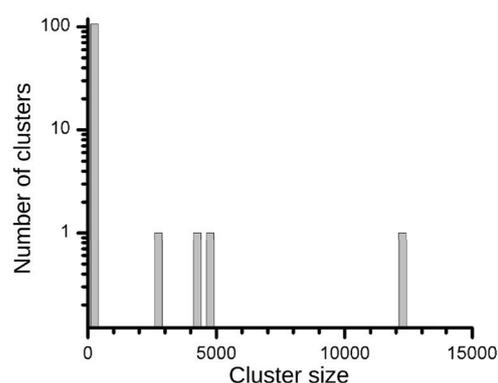
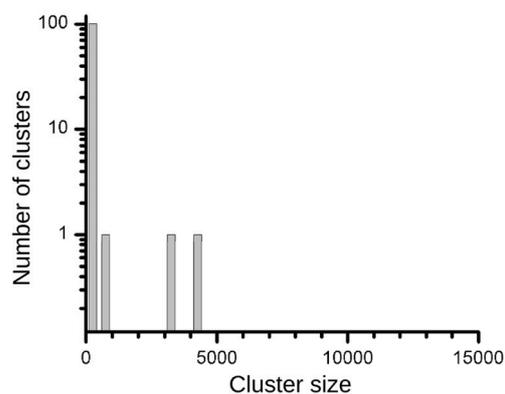


Рис. 2. Изменение температуры в моделируемой системе после нагрева. Черная кривая соответствует исходному кристаллиту с идеальной структурой, серая — кристаллиту с тремя зернами



а



б

Рис. 3. Распределение кластеров по размеру после нагрева кристаллита с межзерненными границами в моменты времени: а — 13,6 пс; б — 14,2 пс после нагрева

Для ускорения процесса синтеза частиц после взрывного разрушения и последующей сложной эволюции системы кластеров и газовой фазы была использована процедура искусственной релаксации к 300 К. Структура моделируемой системы после подрыва проволоочки и проведения процедуры релакса-

ции к 300 К приведена на рисунке 4. Использованная процедура имитирует в определенной степени начальную стадию процесса теплоотвода окружающей средой. Из рисунка 4 видно, что в моделируемой системе сформировались крупные кластеры, которые имеют блочную структуру.

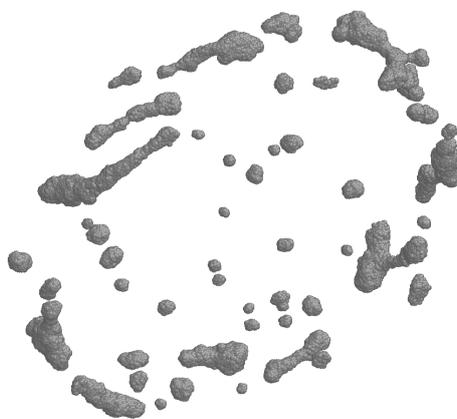


Рис. 4. Структура моделируемой системы после охлаждения к комнатной температуре

Отметим, что проведенное моделирование представляет интерес для выбора наиболее оптимального технологического режима получения

наноразмерных частиц с блочной структурой методом электротеплового импульсного диспергирования.

### Библиографический список

1. Ильин А. П. Структурно-энергетическое состояние электровзрывных ультрадисперсных порошков и процессы релаксации в них // Известия вузов. Физика. — 1996. — № 4.
2. Ильин А. П. Об избыточной энергии ультрадисперсных порошков, полученных методом электрического взрыва проволок // ФХОМ. — 1994. — № 3.
3. Лернер М. И., Давыдович В. И., Сваровская Н. В. Зависимость дисперсности нанопорошков металлов и процесса их агломерации от температуры газовой среды при электрическом взрыве проводников // Физ. мезомех. — 2004. — Т. 7. Спец. вып. Ч. 2.
4. Лернер М. И., Шаманский В. В. Формирование наночастиц при воздействии на металлический проводник импульса тока большой мощности // Журнал структурной химии. — 2004. — Т. 45.
5. Псахье С. Г., Зольников К. П., Крыжевич Д. С., Абдрашитов А. В., Лернер М. И. Стадийность формирования кластеров при электротепловом импульсном диспергировании металлических образцов // Физ. мезомех. — 2010. — Т. 13, № 1.
6. Abdrashitov A. V., Kryzhevich D. S., Zolnikov K. P., Psakhie S. G. Simulation of nanoparticles with block structure formation by electric dispersion of metal wire // Procedia Engineering. — 2010. — V. 2.
7. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. — 1984. — V. 29, № 12.
8. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. B. — 1986. — V. 33, № 12.