

УДК 531.12/.13:539.3:534.1

Возможный механизм передачи энергии механическим ударом

И. А. МАССАЛИМОВ

Институт механики Уфимского научного центра РАН,
ул. К. Маркса, 12, Уфа 450000 (Россия)

E-mail: ismail@bashnet.ru

Аннотация

Изучено явление механического удара с целью определения реакции твердого тела на интенсивные механические воздействия. Процесс удара рассматривается как резкое одновременное изменение скоростей всех атомов соударяющейся частицы. Исследованы вероятность возбуждения кристаллической решетки и условия появления структурных несовершенств в рамках предложенного подхода. Проведены расчеты для кубических одноатомных кристаллов германия, кремния и алмаза.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время механическая активация твердых тел с успехом используется в различных технологических процессах. Применяются различные виды измельчительно-го оборудования (шаровые, вибрационные, планетарные, центробежные, струйные мельницы, атриторы, дезинтеграторы и др.). Хотя механические напряжения, возникающие в различных мельницах, могут сильно отличаться, можно выделить группу аппаратов, имеющих очень близкие условия соударения, например струйные, центробежные мельницы и дезинтеграторы. Для такого рода аппаратов характерны высокие скорости соударений в режиме свободного удара и малые времена взаимодействия. Явление механической активации заключается в преобразовании энергии механического удара в энтакпию активации. В настоящей работе рассмотрен возможный механизм передачи энергии в процессе механической обработки в измельчителях вышеуказанных типов.

МЕТОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Механические напряжения, появляющиеся во время удара, действуют непосредствен-

но на атомную структуру вещества и, как впервые было отмечено в [1], приводят к возбуждению колебаний атомов решетки. Ниже рассматривается возможный механизм передачи энергии механического удара посредством возбуждения механически индуцированных колебаний кристаллической решетки.

Колебания атомов в одноатомной кристаллической решетке рассматриваются как набор независимых квантово-механических осцилляторов [2]. Волновые функции этих гармонических осцилляторов могут быть получены из уравнения [3]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - v(x) \right] \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x) \quad (1)$$

Здесь \hbar – постоянная Планка; m – масса атома; в гармоническом приближении $v(x) = kx^2/2$, где k – силовая постоянная, равная $m\omega^2$, ω – частота тепловых колебаний; n – главное квантовое число осциллятора. Решениями этого уравнения являются волновые функции гармонического осциллятора:

$$\Psi_n(x) = \left(2^n n! a \sqrt{\hbar} \right)^{-1/2} \exp \left[-\frac{x^2}{2a} \right] H_n \left(\frac{x}{a} \right) \quad (2)$$

Здесь $H_n \left(\frac{x}{a} \right)$ – полином Эрмита, $a = \frac{\hbar}{m\omega}$.

E_n – энергия, собственное значение уравнения (1), и оно определяется из уравнения

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3)$$

Процесс удара рассматривается как внешнее и одновременное изменение скоростей всех гармонических осцилляторов. Пусть каждый осциллятор, описываемый уравнениями (2), (3) в момент времени $t = 0$ начинает двигаться со скоростью v . Вероятность возбуждения осциллятора можно найти переходом в систему координат K^1 , которая движется с кристаллической решеткой. Тогда $x^1 = x - vt$.

Волновая функция начального состояния $\Psi_0(x^1)$ связана с волновой функцией осциллятора $\Psi_n(x^1)$ для $t > 0$ соотношением

$$\Psi_n(x^1) = \exp \left[-\frac{imv}{\hbar} x^1 \right] \Psi_0(x^1) \quad (4)$$

Для получения соотношения (4) был использован закон изменения волновой функции при преобразованиях Галилея. Вероятность возбуждения осциллятора или, иначе говоря, вероятность перехода W_{0n} из начального состояния с волновой функцией $\Psi_0(x)$ и энергией E_0 в возбужденное состояние с волновой функцией $\Psi_n(x)$ и энергией E_n описывается соотношением

$$W_{0n} = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n(x) \exp \left[-\frac{imvx}{\hbar} \right] \Psi_0(x) dx \right]^2 \quad (5)$$

Расчет интеграла (5) дает

$$W_{0n} = \frac{1}{n!} \left(\frac{mv^2}{2\hbar\omega} \right)^n \exp \left[-\frac{mv^2}{2\hbar\omega} \right] \quad (6)$$

Таким образом, рассмотрение механического удара как процесса резкого изменения скоростей атомных гармонических осцилляторов дает непосредственно вероятность возбуждения механически индуцированных колебаний решетки. Величина W_{0n} означает вероятность перехода осциллятора на n -й возбужденный уровень. Зависимость вероятности W_{0n} ударного возбуждения для первых двух значений n от параметра $q = mv^2/2\hbar\omega$ показана на рис. 1. Все функции W_{0n} безразмерны и нормированы, так что

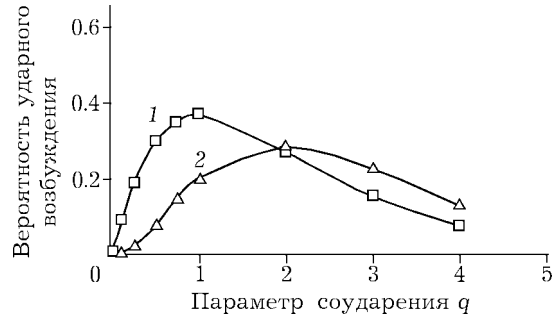


Рис. 1. Вероятность ударного возбуждения в зависимости от параметра $q = mv^2/2\hbar\omega$: 1 – функция W_{01} ; 2 – функция W_{02} .

$$\sum_{n=0}^{\infty} W_{0n} = 1$$

Здесь W_{00} – вероятность того, что система останется в основном невозбужденном состоянии. Параметр соударения q также является безразмерным. Из рис. 1 можно видеть, что максимальные значения функции W_{0n} наблюдаются в точках $mv^2/2 = n\hbar\omega$. Практический интерес представляют условия возбуждения колебательных уровней с наименьшими затратами энергии, т. е. для переходов на первый возбужденный уровень, вероятность возбуждения которого определяется функцией W_{01} . Максимальное значение W_{01} наблюдается тогда, когда

$$mv^2/2 = \hbar\omega \quad (7)$$

Соотношение (7) означает, что максимальное значение вероятности возбуждения кристаллической решетки и, соответственно, максимальный эффект механического воздействия наблюдаются для скоростей, при которых кинетическая энергия удара, приходящаяся на один атом, близка к энергии кванта колебаний кристаллической решетки.

Считая, что (7) выполняется, амплитуду колебаний r_m , индуцированную механическим ударом, можно рассчитать, используя соотношение

$$mv^2/2 = m\omega^2 r_m^2/2$$

Отсюда можно получить

$$r_m = v/\omega \quad (8)$$

Это соотношение выражает атомную амплитуду колебаний r_m , обусловленную механическим ударом, как функцию скорости соуда-

рений. При определенных критических значениях скоростей соударений v_{cr} амплитуда r_m может достигнуть некоторого критического значения r_{cr} , при котором равновесное положение атома в кристалле станет неустойчивым и появится возможность смещения атомов в междоузлия. Далее вводится следующее соотношение:

$$a_{cr} = r_{cr}/R \quad (9)$$

Позднее a_{cr} будет использоваться в качестве критерия возникновения нарушений решетки, вызванных механическим ударом. Используя соотношения (8), (9), можно получить следующее уравнение:

$$v_{cr} = a_{cr}wR \quad (10)$$

Это уравнение выражает v_{cr} через атомную частоту и межатомные расстояния. Исключая w из (10) и используя соотношение (7), можно получить следующее выражение:

$$v_{cr} = 2\hbar / (a_{cr}mR^2) \quad (11)$$

ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, предположив, что структурные несовершенства в твердом теле появляются по мере того, как амплитуды атомных колебаний начинают превышать определенное критическое значение, мы получили уравнение, связывающее скорость соударений, атомную массу, межатомные расстояния и частоту колебаний атомов. Смысл величины v_{cr} следующий: это скорость соударений, необходимая для того, чтобы раскачать атом в кристалле до амплитуды $r_{cr} = a_{cr}R$. Это вы-

ражение полезно, так как позволяет оценить эффективный режим механической обработки, используя атомные характеристики кристалла и величину a_{cr} . Последнюю можно получить из хорошо известного критерия Линдемана [4], согласно которому в большинстве случаев кристалл плавится, когда амплитуды колебаний достигают 10 % от межатомного расстояния, т. е. $a_{cr} \gg 0.1$. Чтобы проиллюстрировать возможности полученных соотношений, проведены расчеты величины v_{cr} для кубических изоструктурных кристаллов алмаза, германия и кремния, имеющих решетку типа алмаза и в то же время отличающихся механическими и физическими характеристиками. В расчетах использовалось значение $a_{cr} = 0.1$. Результаты расчетов приведены в табл. 1. Так как современное оборудование, например дезинтеграторы, позволяет достигать скорости соударений порядка 450 м/с, на основании расчетов можно утверждать, что режим эффективной механической обработки легко достигим для германия ($v_{cr} = 180$ м/с), возможен для кремния ($v_{cr} = 410$ м/с) и нереален для алмаза ($v_{cr} = 1680$ м/с).

Далее из (7) и (10) можно получить

$$w = \hbar / (0.005 mR^2) \quad (12)$$

Отсюда w_{cr} – частота атомных колебаний с амплитудой $r_{cr} = 0.1R$. Расчеты показали, что w_{cr} для Ge и Si находится внутри соответствующего диапазона инфракрасного спектра (ИКС), тогда как для алмаза $w_{cr} > w$ для любой частоты из ИКС алмаза. Это объясняет, почему столкновения с $v = v_{cr}$ эффективно возбуждают решеточные колебания Ge и Si с

ТАБЛИЦА 1

Физические и механические параметры алмаза, кремния и германия

Параметр	Алмаз	Кремний	Германий	Литературная ссылка
Объемный модуль упругости, 10^{11} Н/м ²	5.45	0.988	0.772	[5]
Модуль упругости, 10^{10} Дж/м ³	93.88	11.35	9.39	[5]
Температура плавления, °С	3500	1420	937	[6]
Межатомное расстояние, Å	1.54	2.35	2.44	[7]
Частотный диапазон ИКС, см ⁻¹	550–1250	100–530	65–300	[8]
Критическая частота w_{cr} , см ⁻¹	1433	233	97	
w_{cr} , 10^{13} с ⁻¹	4.3	0.70	0.29	
Критическая скорость v_{cr} , м/с	1680	410	180	

амплитудами $r_m \sim 0.1R$ и приводят к появлению структурных нарушений. В то же время результаты расчетов для алмаза могут быть интерпретированы как невозможность достижения условия $r_m = 0.1R$ для любой частоты из диапазона ИКС. Это означает, что энергии из диапазона ИКС недостаточно для того, чтобы раскачать атомы до необходимой амплитуды, а вероятность поглощения $\hbar\omega_{cr}$ очень мала, так как находится за пределами диапазона ИКС. По-видимому, этот факт является причиной уникальной устойчивости кристаллической решетки алмаза по отношению к механическим и тепловым воздействиям.

Таким образом, рассмотрение механического удара как процесса резкого изменения скоростей атомных гармонических осцилляторов позволяет оценить вероятность возбуждения механически индуцированных решеточных колебаний, которая сильно зависит от скорости соударения. Стадия эффективного возбуждения решеточных колебаний – первый необходимый шаг процесса передачи энергии твердому телу механическим ударом. Эта энергия механически индуцированных колебаний может поглотиться решеткой посредством образования структурных несовершенств, если амплитуда этих колебаний будет превышать определенные критические значения. В противном случае энергия этих

колебаний расходуется на нагрев и другие радиационные и эмиссионные явления.

Результаты, полученные для кубических кристаллов германия, кремния и алмаза, ясно указывают, что по мере повышения механических и термических параметров, характеризующих стабильность кристаллов, необходимо увеличивать скорость соударений. Установлено, что устойчивость кристаллических структур по отношению к механическим и термическим возмущениям в пределах предложенного подхода определяется расположением ключевого параметра w_{cr} относительно диапазона ИКС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 В. В. Болдырев, *Кинетика и катализ*, 13 (1972) 1411.
- 2 А. Анималу, *Квантовая теория кристаллических твердых тел*, Мир, Москва, 1981.
- 3 Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика, Нерелятивистская теория*, Наука, Москва, 1974.
- 4 F. A. Lindemann, *Phys. Z.*, 11 (1910) 609.
- 5 У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел. Физика химической связи*, Мир, Москва, 1983.
- 6 А. И. Ефимов, *Свойства неорганических соединений: Справочник*, Химия, Москва, 1983.
- 7 Б. Ф. Ормонт, *Структура неорганических веществ*, Гостехтеоретиздат, Москва, 1950.
- 8 Дж. Бирман, *Пространственная симметрия и оптические свойства твердых тел*, т. 2, Мир, Москва, 1978.