

Молекулярно-динамическое моделирование процесса твердофазного горения в системе Ti/Al

С.А. Рогачев

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук, Черноголовка, Россия
RogachevSA@gmail.com

Введение

Подход к исследованию процессов происходящих в материалах на наноуровне, методом молекулярно-динамического моделирования, все чаще применяется в различных областях. Однако работ применяющих этот подход к исследованию процессов твердопламенного горения пока остается немного. Из них можно выделить работу [1] рассматривающую процесс спекания двух сферических частиц из никеля и алюминия. Также заслуживает внимания работа по распространению волны горения по многослойной реакционной нанопленке, состоящей из никеля и алюминия [2]. В данной работе мы применим молекулярно-динамический подход к процессу горения в системе Ti/Al [3].

Модельная система и результаты

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось с использованием программного пакета LAMMPS[4]. Потенциал взаимодействия для атомов титана и алюминия был взят из работы [5]. В моделировании существует несколько подходов к исследованию процесса горения в системе TiAl. Первый метод заключается в спекании сферических частиц титана и алюминия различного радиуса и при различной начальной температуре. Второй подход состоит в исследовании распространения волны горения по многослойной реакционной нанопленке, состоящей из чередующихся слоев титана и алюминия. Рассмотрим, сначала первый метод.

Моделируемая система состояла из частицы титана радиусом 3 нм (количество атомов 6338) и частицы алюминия радиусом 2.95 нм (количество атомов 6530). В начальный момент времени частицы касаются друг друга, как показано на рис. 1. Начальная температура системы равнялась 800К. Изменение температуры системы во времени показано на рис. 2. Температура плавления алюминия равна 933 К, но стоит учесть тот факт, что для небольших частиц температура плавления будет на несколько сотен градусов меньше, чем температура плавления большого непрерывного бруска.

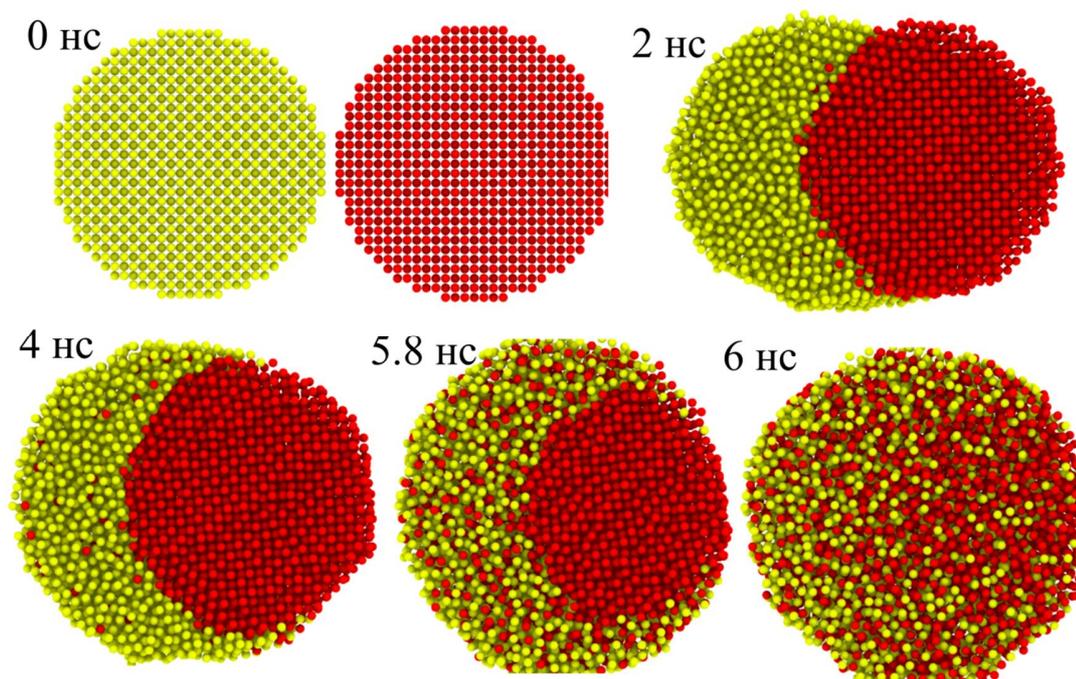


Рисунок 1. Спекание частиц титана и алюминия. Системы показаны в срезе проходящем через центры сфер. Желтые сферы – атомы алюминия, красные – атомы титана. Показано изменение структуры во времени.

Поэтому уже в начальный момент времени частица алюминия находится в около расплавленном состоянии. Крайние точки сфер находятся на расстоянии 0.2 нм друг от друга, этого расстояния хватает, чтобы атомы титана и алюминия вступили во взаимодействие на границе. Более пластичный алюминий начинает покрывать частицу титана по всей поверхности. Вплоть до 5 нс температура в образце растет в основном за счет образования продукта на поверхности частицы титана. Молекулярно динамический расчет показал, что диффузия атомов титана в алюминии мала вплоть до 1100 К. По достижению температуры в 1200 К частица титана сохраняет свою кристаллическую структуру, будучи практически полностью «обернутой» алюминиевым слоем, при этом выделение тепла идет за счет диффузии атомов титана с поверхности в жидкий алюминий. Это кардинальным образом меняет скорость процесса и наблюдается скачкообразный рост температуры во временном интервале от 5.7 нс до 6.1 нс. (рис. 2). Температуры частицы после синтеза составляет 1550 К. Таким образом, температура в образце выросла на 750 К.

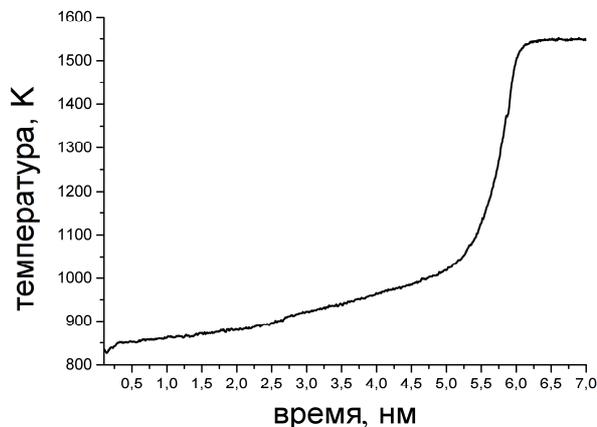


Рисунок 2. Зависимость средней температуры системы от времени.

Если начальная температура частиц окажется ниже некоторого порогового значения, то спекание частиц не произойдет вовсе. Это пороговое значение зависит от радиуса рассматриваемых частиц. Численный эксперимент показал, что для частиц радиусом 2 нм, эта пороговая температура равна 650 К. А с ростом температуры увеличивается и скорость полного превращения исходных реагентов. При начальной температуре равной 700 К система полностью прореагирует за 0.9 нс; при 800 К за 0.3 нс; при 900 К за 0.18 нс; при 1000 К за 0.12 нс.

Второй подход к моделированию заключался в создании многослойной системы состоящей из слоев титана (количество атомов 52800) и алюминия (количество атомов 51660). Начальную структуру можно увидеть в правой половине рисунка рис. 3б. Размеры системы составляли 166 нм в длину, 81 нм в ширину и 1.3 нм в высоту. Вдоль осей y и z были взяты периодические граничные условия. Начальная температура равнялась 700 К. Зажигание осуществлялось путем повышения температуры в левой части образца, размером 25 нм по оси x , до температуры в 1500 К. На рис. 3а изображен температурный профиль системы спустя 1.8 нс после зажигания. Алюминий в зоне прогрева находится в жидкой фазе, титан в твердой (рис. 3в). В зоне реакции диффузия атомов титана в алюминий существенно возрастает. Вполне применимым для такой системы оказывается приближение узкой зоны реакции. За фронтом горения из расплава начинает формироваться зернистая структура (рис. 3в). Адиабатическая температура горения составила 1500 К.

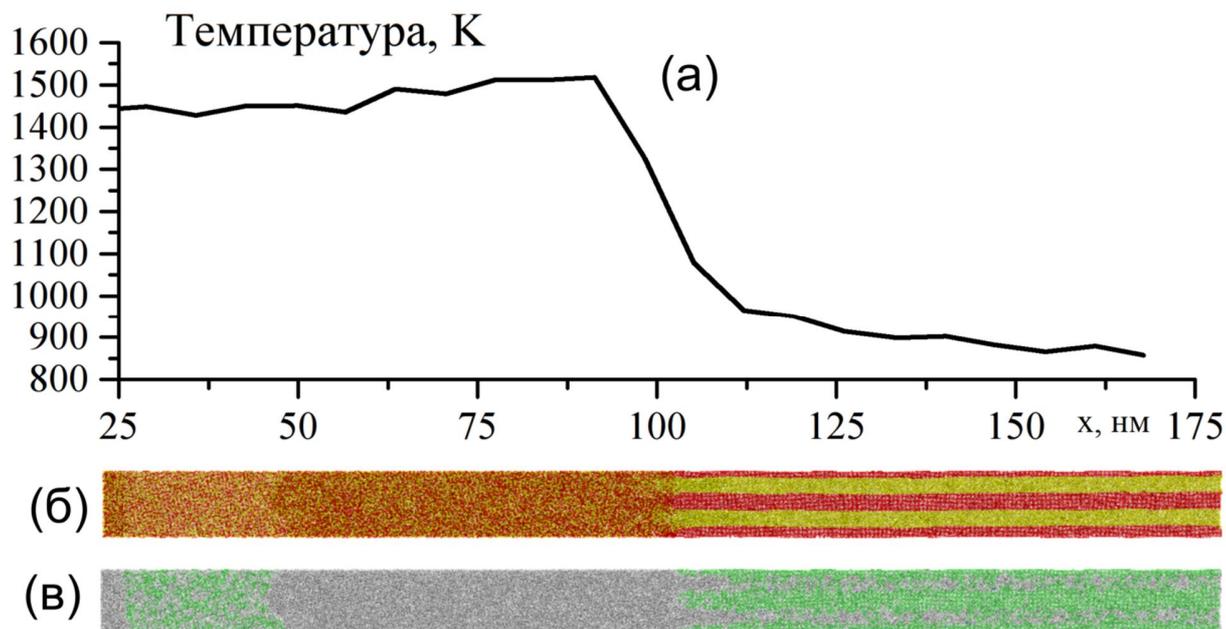


Рисунок 3. Температурный профиль (а) и атомарный вид системы (б). Желтыми и красными сферами изображены атомы алюминия и титана соответственно. На рисунке (в) зеленым цветом обозначены атомы, принадлежащие кристаллической решетке.

Выводы

Молекулярно динамическое моделирование позволяет заглянуть в те размеры и систем и в такие малые времена, которые пока слабо доступны для экспериментального исследования. Не смотря на то, что наночастицы часто обладают физическими свойствами, сильно отличающимися от свойств реальных сыпучих материалов, некоторые результаты все же можно сравнить с экспериментальными данными. Так, например, результаты моделирования горения в системе TiAl, показывают, что для реакции достаточно одного расплавленного реагента, а второй может оставаться в кристаллической решетке. Также показано существование некоторой предельной температуры, после которой существенно возрастает диффузия атомов титана в расплавленный алюминий.

Литература

[1] B.J. Henz, T. Hawa, M. Zachariah, Journal of applied physics, 105, (2009), 124310.

[2] V Turlo, O Politano, F Baras, Journal of Alloys and Compounds, 708, (2017), 989-998.

- [3] А. С. Рогачев, А. Э. Григорян, Е. В. Илларионова, Физика горения и взрыва, т. 40, № 2, (2004), 45-51.
- [4] S. Plimpton, J. Comput. Phys. 117, (1995), 1, <http://lammps.sandia.gov/>.
- [5] R.R. Zope, Y. Mishin, Physical Review B, **68(2)**, 24102.