

PACS: 82.40.Fр, 91.35.Еd

А.В. Добромислов¹, Н.И. Талуц¹, Е.А. Козлов²

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СМЕСИ КВАРЦА
С АЛЮМИНИЕМ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СФЕРИЧЕСКИ СХОДЯЩИХСЯ
УДАРНЫХ ВОЛН И ВНУТРЕННЕЕ СТРОЕНИЕ ЗЕМНОЙ МАНТИИ

¹Институт физики металлов УрО РАН
ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620041, Россия
E-mail: Dobromyslov@imp.uran.ru

²РФЯЦ-ВНИИТФ
г. Снежинск, Россия

С целью моделирования внутреннего строения Земли проведен эксперимент по ударному обжатию шара из смеси алюминия с кварцем в соотношении 1:1 сферически сходящимися ударными волнами с начальным давлением на поверхности 48 GPa. На основе расчетных профилей давления $P(R, r)$ для выделенных лагранжевых частиц R сделаны оценки реализованных давлений в зависимости от положения слоя в образце. Обнаружено, что в результате протекания физико-химических реакций в шаре происходит образование нескольких кольцевых зон с разным фазовым составом. Полученные данные о фазовом составе продуктов превращения в различных слоях компакта сопоставлены со структурой слоев земной мантии. Установлено, что давление начала аморфизации кварца 22–24 GPa соответствует давлению перехода от верхней к нижней мантии Земли.

В настоящее время большое значение для понимания различных вопросов минералогии, ударного метаморфизма и строения Земли приобретает проведение модельных взрывных экспериментов. Среди известных схем ударного воздействия наиболее предпочтительным является способ нагружения с помощью сферически сходящихся ударных волн [1–3]. Такой способ можно использовать в целях моделирования внутреннего строения Земли, поскольку при распространении ударных волн внутри сферических образцов реализуются условия, при которых находится вещество в различных слоях мантии и ядра. Аналогично тому, как с увеличением глубины внутри Земли растут давление и температура, при распространении в образце сферически сходящейся ударной волны на ее фронте также непрерывно растут амплитуда и температура, достигая в центральных слоях образца давлений мегабарного диапазона и температур в несколько тысяч градусов. Задачей данного исследования было изучение фазового и структурного состояний компакта из

смеси порошков кварца и алюминия после нагружения сферически сходящимися ударными волнами и сопоставление фазового состава продуктов превращений с положением различных слоев земной мантии.

Методика эксперимента

В качестве объекта исследования использована смесь порошков кварца и алюминия в соотношении 1:1. Плотность компакта $\rho_0 = 2.67 \text{ g/cm}^3$. Из полученной цилиндрической заготовки изготавливали шар диаметром 48.85 mm, который заваривали в специальную оболочку из нержавеющей стали 12X18H10T. Нагружение осуществляли сходящейся детонационной волной сферического слоя взрывчатого вещества толщиной 8 mm. Давление на внешней поверхности оболочки составляло 48 GPa, а длительность импульса нагрузки – 3 μs . Сохраненный образец разрезали по меридиональной плоскости алмазным кругом. Послойный анализ структуры и фазового состава образца осуществляли с использованием рентгеноструктурного анализа, оптической и сканирующей электронной микроскопии.

Результаты и их обсуждение

В центре первоначально сплошного компакта после нагружения образовалась полость, внутри которой был обнаружен металлический шарик. На меридиональном сечении образца вокруг полости наблюдается присутствие пяти concentрических зон, отличающихся друг от друга контрастом (рис. 1). Зона 3 состоит из трех тонких слоев, по-разному отражающих свет.

Присутствие в образце нескольких различных зон характеризует особенности протекания процессов в смеси порошков кварца и алюминия в различных диапазонах давлений. На основе расчетных профилей давления для выделенных (фиксированных) лагранжевых частиц были сделаны оценки изменения давления в исследуемом образце в зависимости от положения по радиусу на сходящейся и отраженной от центра расходящейся ударных волнах (рис. 2).

Ниже приводятся данные о фазовом составе различных зон.

Наиболее протяженная зона 1. В этой зоне рентгенографически обнаруживается присутствие только исходных компонентов (рис. 3,а,б). Микроструктура зоны 1 состоит из частиц α -кварца неправильной формы, окруженных областями алюминия.

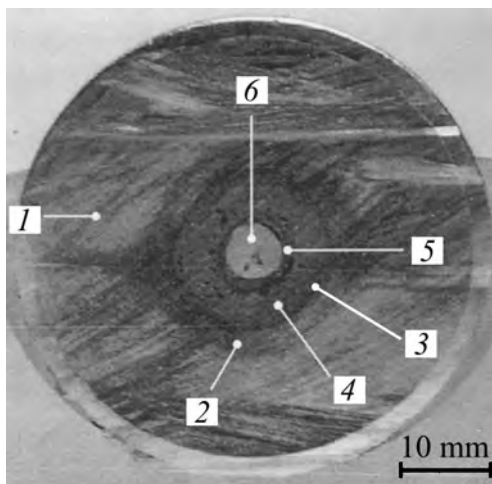


Рис. 1. Меридиональное сечение шара из смеси кварца и алюминия после нагружения сферически сходящейся ударной волной; цифрами обозначены визуально наблюдаемые зоны

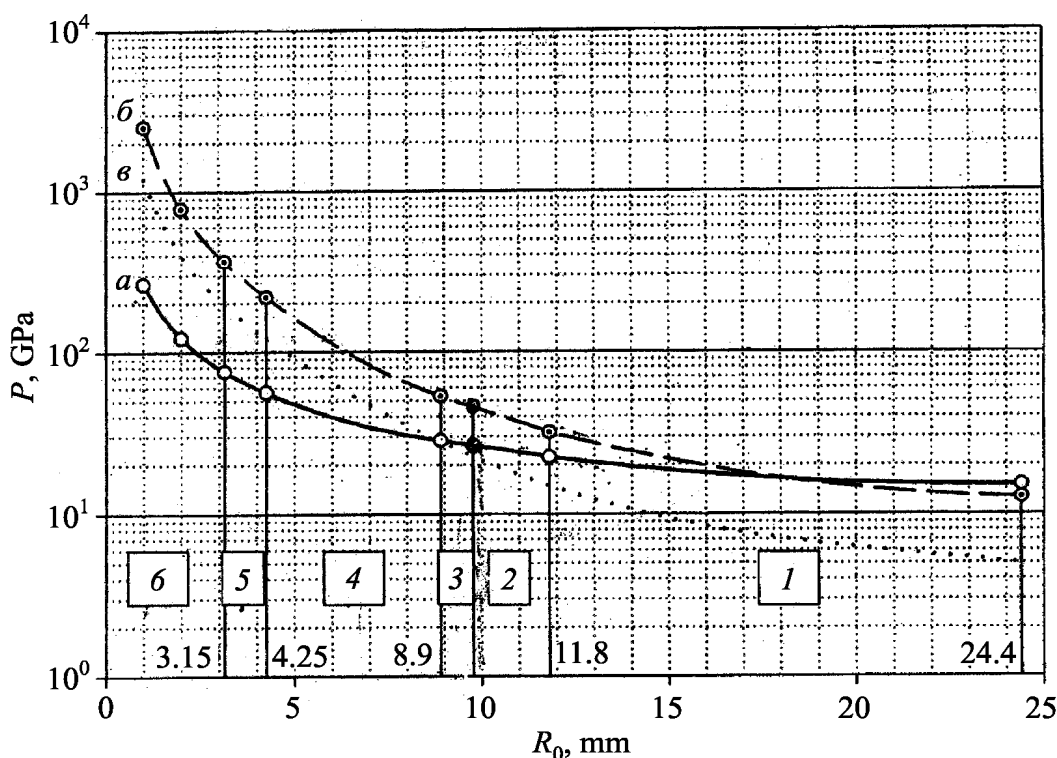


Рис. 2. Параметры нагружения лагранжевых частиц смеси кварца с алюминием в визуально наблюдаемых зонах 1–6: а – сходящаяся ударная волна; б – расходящаяся; в – геометрическое место состояний перед отраженной (расходящейся) ударной волной

При переходе к зоне 2 заметного изменения микроструктуры не наблюдается. Однако вид рентгенограмм меняется: от линий α -кварца остается только слабая размытая линия (101), на которой присутствуют текстурные максимумы, и очень слабая, сильно размытая линия (112) (рис. 3,в). Значительное уменьшение интенсивности линий α -кварца при сохранении его общего количества в структуре свидетельствует об аморфизации α -кварца. Кроме того, на рентгенограмме появляется одна дополнительная линия, соответствующая самой сильной линии оксида кремния SiO_2 .

На рентгенограммах, полученных от зоны 3, все линии α -кварца полностью исчезают, и появляются линии, принадлежащие кремнию (рис. 3,з). Кроме того, присутствуют слабые фрагменты линий $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, интенсивность которых несколько возрастает в подзоне 3. В подзонах 1 и 2 также наблюдается образование различных промежуточных соединений, которые исчезают в подзоне 3.

На рентгенограммах, полученных от различных слоев зоны 4, наблюдаются в основном линии $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, кремния и алюминия, интенсивность и вид которых меняются с увеличением глубины залегания слоя (рис. 3,д). Анализ изменения дифракционной картины свидетельствует о том, что только в этой зоне происходит интенсивное образование $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Кроме того, на рентгенограммах наблюдается присутствие разных дополнительных линий, количество и расположение которых зависит от глубины залегания слоя в зоне. Часть этих линий не удалось отнести к каким-либо определенным фазам.

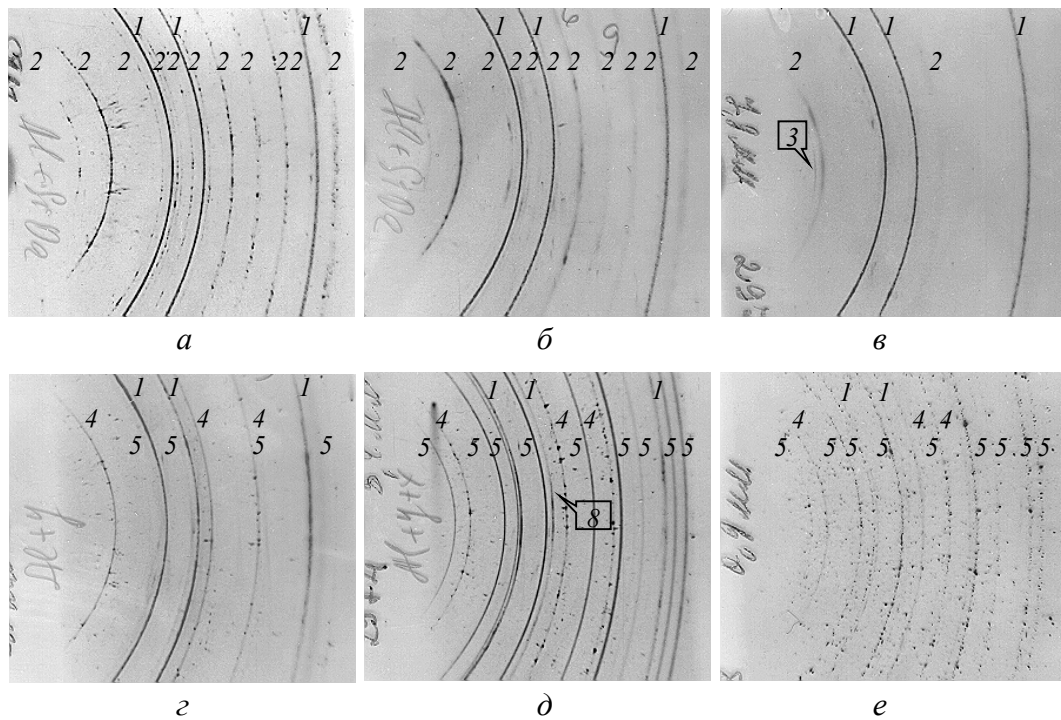


Рис. 3. Рентгенограммы, полученные от слоев, расположенных на разных радиусах R , мм: *a* – 21.4, *б* – 12.1, *в* – 11.1, *з* – 9.2, *д* – 8.6, *е* – 4.1. Цифрами обозначены линии фаз: 1 – Al; 2 – α -кварц; 3 – SiO_2 , гексагональный; 4 – Si; 5 – $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$; 8 – нерасшифрованная фаза x_1 с $d = 0.194$ nm

При переходе к зоне 4 кристаллы кварца полностью исчезают, и наблюдаются большие области с пятнистым контрастом. Можно предположить, что эти области состоят из $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и каких-то промежуточных продуктов реакций между алюминием и кварцем. При увеличении глубины залегания слоя внутри них появляются темные области неправильной формы, являющиеся областями $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. При приближении к границе зоны 5 размеры областей $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ сильно увеличиваются. Кремний наблюдается в виде областей различной формы, в некоторых случаях – сферической. Максимальный размер сферических выделений кремния может достигать 200 μm .

Толщина зоны 5 составляет ~ 0.9 mm. Внутренней границей зоны 5 является поверхность полости. В основном в этой зоне наблюдаются протяженные области $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и небольшое количество выделений Si (рис. 3,е). На внутренней поверхности полости видны следы плавления и многочисленные кристаллы корунда правильной формы. Шарик, образовавшийся внутри полости, является зоной б. На дифрактограмме, полученной от данного шарика, присутствуют только линии алюминия и кремния. Это указывает на то, что шарик представляет собой сплав алюминия с кремнием.

В целом полученные результаты свидетельствуют о том, что в процессе изменения давления и температуры на фронте ударной волны происходят сложные изменения в структуре исходной смеси. Наиболее ха-

рактерной особенностью таких структурных превращений является то, что они начинают протекать только после достижения определенного критического давления. Первые изменения в кварце начинаются при критическом давлении 22 GPa, при котором происходит аморфизация кварца. После достижения ~ 45 GPa начинается твердофазная реакция разложения SiO_2 , приводящая к выделению чистого кремния. Критическое давление, необходимое для протекания твердофазной химической реакции образования Al_2O_3 , составляет ~ 50 GPa, т.е. процессы образования кремния и $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ разделены в масштабе давлений. Это указывает на то, что кислород в некотором диапазоне давлений и температур в соответствующих слоях существовал в свободном и, возможно, в атомарном состояниях. В работе [4] ранее было высказано предположение, что разложение оксидов с выделением кислорода могло иметь место при формировании Земли и этот процесс определил появление свободного кислорода в ее атмосфере. Поэтому обнаруженный нами факт существования свободного кислорода при давлениях и температурах ниже определенных значений свидетельствует в пользу такого предположения. При сопоставлении имеющихся данных о внутреннем строении Земли и наших результатов о фазовом составе продуктов, образовавшихся в сохраненном после ударного воздействия компакте в разных диапазонах давлений, обнаруживается, что переход от верхней мантии к внутренней в шкале давлений совпадает с переходом кварца в аморфное состояние (рис. 4). В средних слоях нижней мантии кремний и Al_2O_3 присутствуют в твердом состоянии, а при приближении к внешнему ядру они переходят в жидкое состояние.



Рис. 4. Сравнение полученных данных о фазовом составе различных слоев компакта после ударного нагружения с положением слоев в земном шаре

Заключение

Проведен эксперимент по ударному обжатию шара из смеси кварца с алюминием в соотношении 1:1 сферически сходящимися ударными волнами с начальным давлением на поверхности 48 GPa. На основе расчетных профилей давления $P(R, r)$ для выделенных (фиксированных) лагранжевых частиц R сделаны расчетные оценки реализованных давлений в зависимости от удаления от поверхности нагружения сферического образца. Обнаружено, что в результате ударного воздействия в шаре образуются шесть кольцевых зон с разным фазовым составом. В приповерхностной зоне 1 происходят деформация порошков алюминия и кварца и дополнительное компактирование исходной смеси, а в зоне 2 – аморфизация кварца. Установлено, что протекание твердофазных химических реакций начинается только после достижения определенного критического давления. После достижения давления 45 GPa начинается твердофазная реакция разложения SiO_2 , приводящая к выделению чистого кремния. Начало выделения кремния и протекание химической реакции образования Al_2O_3 разделены в масштабе давлений. Появление в центральной части образца области, состоящей из корунда и металлического шарика из сплава Al–52.8 at.% Si, является следствием расслоения расплава алюминия, кремния и Al_2O_3 и их последующей раздельной кристаллизации.

Полученные данные о фазовом составе продуктов превращения в различных слоях компакта сопоставлены со структурой слоев земной мантии. Установлено, что давление начала аморфизации кварца 22 GPa соответствует давлению границы перехода от верхней мантии к нижней (рис. 4).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 08-05-00165-а).

1. E.A. Kozlov, High Pressure Research **10**, 541 (1992).
2. E.A. Kozlov, Yu.N. Zhugin, B.V. Litvinov et al., Khim. Fiz. **14**, 108 (1995).
3. E.A. Kozlov, B.V. Litvinov, E.V. Abakshin et al., Fiz. Met. Metalloved. **79**, 113 (1995) [Phys. Met. Metallogr. **79**, 662 (1995)].
4. В.В. Бражкин, Р.Н. Волошин, А.Г. Ляпин, С.В. Попова, УФН **173**, 1359 (2003).

A.V. Dobromyslov, N.I. Taluts, E.A. Kozlov

PHYSICAL AND CHEMICAL TRANSFORMATIONS IN QUARTZ-ALUMINIUM MIXTURE UNDER THE ACTION OF SPHERICAL CONVERGING SHOCK WAVES AND THE INTERNAL STRUCTURE OF EARTH MANTLE

Mixture of aluminum and quartz powders taken in a ratio of 1:1 was loaded by spherical converging shock waves with the purpose of modelling the internal structure of the Earth. The pressures in the converging shock wave and in the diverging shock wave reflected

from the center of the sample have been estimated as a function of the radial position of Lagrangian particles on the basis of the calculated pressure profiles $P(R, t)$. A number of concentric layers (zones) have been observed in a meridian section of the sample after shock-wave loading. The data on the phase composition of different zones are considered in view of pressures induced by the converging and diverging shock waves at their boundaries. It is established that amorphisation pressure corresponds to pressure of transition from the upper to the lower mantle of the Earth.

Fig. 1. Meridional section of the sphere consisting of quartz-aluminum mixture after loading by a spherical converging shock wave, the numerals designate the visually observed zones

Fig. 2. Loading parameters for the Lagrangian particles of the quartz-aluminum mixture in visually observed zones 1–6: a – converging shock wave; \bar{b} – diverging shock wave; \bar{e} – locus of the states in front of the reflected (diverging) shock wave

Fig. 3. X-ray diffraction patterns obtained from the layers located at different depths along the radii R , mm: a – 21.4, \bar{b} – 12.1, \bar{e} – 11.1, \bar{z} – 9.2, \bar{d} – 8.6, \bar{e} – 4.1. The numerals designate the lines of the phases: 1 – Al; 2 – α -quartz; 3 – hexagonal SiO_2 ; 4 – Si; 5 – α - Al_2O_3 ; 8 – unidentified phase x_1 with $d = 0.194$ nm

Fig. 4. Comparison of the data on phase structure of various layers of the sample after shock wave loading with position of layers in the Globe