

СЕМЕЙСТВО УДАРНЫХ АДИАБАТ ТВЕРДОГО ТЕЛА С РАЗЛИЧНЫМИ НАЧАЛЬНЫМИ ТЕМПЕРАТУРАМИ

А. М. Молодец

Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, molodets@icp.ac.ru

Рассмотрено семейство ударных адиабат простого твердого тела в зависимости от его начального термодинамического состояния. Каждая из ударных адиабат этого семейства рассчитывается с использованием известной опорной ударной адиабаты монолитного материала при заданных начальных условиях. Рассмотрены начальные состояния с различными температурами монолитных и пористых материалов. Показано, что нагрев изменяет ударную адиабату твердого тела на ≈ 0.01 %/К.

Ключевые слова: ударная адиабата, уравнения состояния, высокое давление, коэффициент Грюнайзена.

ВВЕДЕНИЕ

В ряде научных и прикладных задач ударного нагружения [1–9] проводится предварительное изменение начальной температуры образцов. Обычно считается, что нагрев или охлаждение практически не изменяют ударную адиабату. Однако специальные экспериментальные исследования ударного сжатия предварительно нагретых образцов [10, 11] свидетельствуют о значительном эффекте. Вместе с тем проведение ударно-волнового эксперимента при повышенных начальных температурах образцов существенно сложнее, а точность ниже, чем в опытах с образцами при начальной комнатной температуре. В этой связи представляют интерес теоретические методы расчета ударных адиабат при изменении начальной температуры материала. Предлагаются различные способы учета этого эффекта [4, 7, 8]. Так, в [4] предложен расчет с использованием термического и калорического уравнения состояния материала. Упрощенный способ учета влияния начальной температуры на коэффициент c_0 в эмпирическом выражении для скорости ударной волны $D(T_0) = c_0(T_0) + su$ (u — массовая скорость) предложен в [7]. При этом второй эмпирический коэффициент s считался постоянным. Цель данной работы — рассчитать влияние начального нагрева образцов на вид ударной адиабаты материала, подчиняющегося уравнению состояния Ми — Грюнайзена.

УДАРНОЕ СЖАТИЕ МОНОЛИТНОГО МАТЕРИАЛА С РАЗЛИЧНЫМИ НАЧАЛЬНЫМИ ТЕМПЕРАТУРАМИ

В физике ударных волн известен способ расчета давления $P_{h,p}$ на ударной адиабате пористого материала по давлению P_h на «опорной» ударной адиабате монолитного материала [12]:

$$P_{h,p} = \frac{P_h(1 + 0.5\gamma(1 - V_0/V))}{1 + 0.5\gamma(1 - V_{00}/V)}. \quad (1)$$

Здесь V — удельный объем на ударных адиабатах, V_0 и V_{00} — удельные объемы соответственно монолитного и пористого материалов при начальных комнатных условиях. Формула (1) справедлива при условии, что монолитный материал подчиняется уравнению состояния Ми — Грюнайзена, в котором коэффициент Грюнайзена зависит только от объема.

В [12] предполагалось, что начальная удельная внутренняя энергия пористых материалов такая же, как и у соответствующих монолитных материалов. В качестве зависимости $\gamma = \gamma(V)$ принималось линейное соотношение $\gamma = \gamma_0 V/V_0$. Было показано хорошее согласие между расчетами по формуле (1) и экспериментальными ударными адиабатами образцов различной пористости из алюминия, меди и железа до давлений $\approx 100 \div 200$ ГПа.

Очевидно, что формула (1) может быть применена и для расчета давления $P = P(V, T_{01})$ на ударной адиабате предварительно нагретого (или охлажденного) монолитного

материала по давлению $P_h(V, T_0)$ на «опорной» ударной адиабате этого же монолитного материала. Но при этом формулу (1) необходимо дополнить разностью начальных внутренних энергий материала в его различных начальных термодинамических состояниях.

Следуя логике [12–14] и используя закон сохранения энергии для ударной волны в случае монолитного материала при двух начальных температурах T_0 и T_{01} , удельных объемах $V_0 = V_0(T_0)$ и $V_{01} = V_{01}(T_{01})$, внутренних энергиях $E_0 = E_0(V_0, T_0)$ и $E_{01} = E_{01}(V_{01}, T_{01})$ и начальном атмосферном давлении $P_0 \cong 0$, можно аналогично [10] записать

$$P = \frac{P_h(1 + 0.5\gamma(1 - V_0/V)) + \gamma(E_{01} - E_0)/V}{1 + 0.5\gamma(1 - V_{01}/V)}. \quad (2)$$

ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ГРЮНАЙЗЕНА ОТ УДЕЛЬНОГО ОБЪЕМА

Заметим, что формула (2) получена на основе закона сохранения энергии и модели Ми — Грюнайзена. Используемый в (2) коэффициент Грюнайзена $\gamma = \gamma(V)$ вычислялся в данной работе по соотношению

$$\gamma = \frac{2}{3} + \frac{2V}{aV_0 - V}, \quad (3)$$

в котором, в отличие от [10], отсутствуют подгочные параметры. Здесь $a = 1 + 2/(\gamma_0 - 2/3)$, γ_0 — термодинамический коэффициент Грюнайзена в точке (V_0, P_0, T_0) . Соотношение (3) подтверждено в работе [15] в диапазоне многократных сжатий для металлических, ионного, молекулярного и ковалентного твердых тел.

ВЫЧИСЛЕНИЕ РАЗНОСТИ НАЧАЛЬНЫХ ВНУТРЕННИХ ЭНЕРГИЙ

Разность начальных внутренних энергий $E_{01} - E_0$ в (2) можно вычислить путем интегрирования температурной зависимости теплоемкости, как это делалось в [10]. Однако ее можно вычислить и более удобным на практике способом [16]. Действительно, представим начальные внутренние энергии материала при температурах T_0 и T_{01} и атмосферном давлении $P_0 \cong 0$ в виде суммы потенциальных $E_{0x}(V_0)$, $E_{01x}(V_{01})$ и тепловых $E_{0t}(V_0, T_0)$, $E_{01t}(V_{01}, T_{01})$ составляющих:

$$E_0(V_0, T_0) = E_{0x}(V_0) + E_{0t}(V_0, T_0),$$

$$E_{01}(V_{01}, T_{01}) = E_{01x}(V_{01}) + E_{01t}(V_{01}, T_{01}).$$

Поскольку изменение объема твердых тел при нагревании невелико, разность начальных потенциальных энергий можно выразить через потенциальные давления $P_{01x}(V_{01})$ и $P_{0x}(V_0)$, а затем и через тепловые энергии $E_{01t} = E_{01t}(V_{01}, T_{01})$ и $E_{0t} = E_{0t}(V_0, T_0)$:

$$\begin{aligned} E_{01x}(V_{01}) - E_{0x}(V_0) &\approx \\ &\approx -0.5(P_{01x}(V_{01}) + P_{0x}(V_0))(V_{01} - V_0) = \\ &= 0.5\left(\gamma(V_{01})\frac{E_{01t}}{V_{01}} + \gamma(V_0)\frac{E_{0t}}{V_0}\right)(V_{01} - V_0), \end{aligned}$$

и соответственно величина $E_{01} - E_0$ оказывается равной

$$\begin{aligned} E_{01}(V_{01}, T_{01}) - E_0(V_0, T_0) &\approx 0.5\left(\gamma(V_{01})\frac{E_{01t}}{V_{01}} + \right. \\ &\left. + \gamma(V_0)\frac{E_{0t}}{V_0}\right)(V_{01} - V_0) + E_{01t}(T_{01}) - E_{0t}(T_0). \end{aligned} \quad (4)$$

Таким образом, полная разность начальных внутренних энергий $E_{01} - E_0$ (4) при различных начальных температурах T_{01} и T_0 может быть рассчитана по данным справочной литературы. Действительно, величины $V_0 = V(T_0)$ и $V_{01} = V(T_{01})$ для подавляющего большинства материалов несложно определить по справочным зависимостям коэффициента объемного температурного расширения. Значения $\gamma(V_{01})$ и $\gamma(V_0)$ рассчитываются по (3). Начальные тепловые энергии $E_{0t}(V_0, T_0)$ и $E_{01t}(V_{01}, T_{01})$ при повышенных температурах ($T > \theta_D$) можно рассчитать по модели твердого тела Эйнштейна при соответствующих значениях T :

$$E_t(T) = 3Rn\theta_e\left(0.5 + \frac{1}{\exp(\theta_e/T) - 1}\right), \quad (5)$$

где R — универсальная газовая постоянная, n — количество атомов в элементарной ячейке твердого тела, $\theta_e = 0.75\theta_D$, $\theta_D = \theta_D(V)$ — зависимость характеристической температуры Дебая от объема [17]. Изменение характеристической температуры в зависимости от начального объема при вычислении E_{01t} и E_{0t} по (5) можно учесть согласно формуле из [15]

$$\theta_D(V) = \theta_0 \frac{a^{4/3}}{(a-1)^2} \frac{(1 - V_{01}/aV_0)^2}{(V_{01}/aV_0)^{2/3}}, \quad (6)$$

которая получается в результате интегрирования (3) с константой $\theta_0 = \theta_D(V_0)$.

Таблица 1
Теплофизические свойства
и опорные ударные адиабаты материалов

Материал	ρ_0 , г/см ³	γ_0	θ_D , К	c_0 , км/с	s	A_v , г/моль
Al-2024	2.785	2.10	433	5.328	1.338	26.98
Сталь 304	7.896	2.17	230	4.569	1.490	53.94
MgO	3.585	1.32	941	6.597	1.369	40.304

Примечание. ρ_0 , γ_0 , θ_D — соответственно плотность, коэффициент Грюнайзена и характеристическая температура Дебая при начальных комнатных условиях; c_0 , s — коэффициенты эмпирического соотношения $D = c_0 + su$; A_v — молекулярная масса.

ВЛИЯНИЕ НАЧАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ НА УДАРНУЮ АДИАБАТУ ПОРИСТОГО МАТЕРИАЛА

Очевидно, что ударная адиабата монолитного материала $P(V, T_{01})$ (2) с начальной температурой T_{01} и удельным объемом V_{01} может быть использована для расчета по формуле (1) ударной адиабаты $P_{h,p}(V, T_{01})$ нагретого до этой же температуры пористого материала, удельный объем которого $V_{0m} = mV_{01}(T_{01})$, где m — характеристика пористости. Для этого в формуле (1) P_h и V_0 следует заменить соответственно на P и V_{01} из (2):

$$P_{h,p}(V, T_{01}) = \frac{P(1 + 0.5\gamma(1 - V_{01}/V))}{1 + 0.5\gamma(1 - V_{0m}/V)} \quad (7)$$

— и по-прежнему воспользоваться зависимостью $\gamma = \gamma(V)$ (3).

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Достоверность расчета ударной адиабаты при повышенных начальных температурах по формулам (2) и (3) подтверждается совпадением экспериментальной ударной адиабаты молибдена при начальной температуре 1673 К [10] с расчетом (см. [16]).

В данной работе влияние предварительного нагрева на ударную адиабату подробно исследовано для трех различных материалов (см. табл. 1): алюминиевого сплава, аустенитной нержавеющей стали и периклаза (для последнего рассмотрены ударные адиабаты нагретых пористых образцов). Теплофизические свойства этих материалов, необходимые для расчета начальных внутренних энергий, и ударные адиабаты монолитных материалов из [18] при

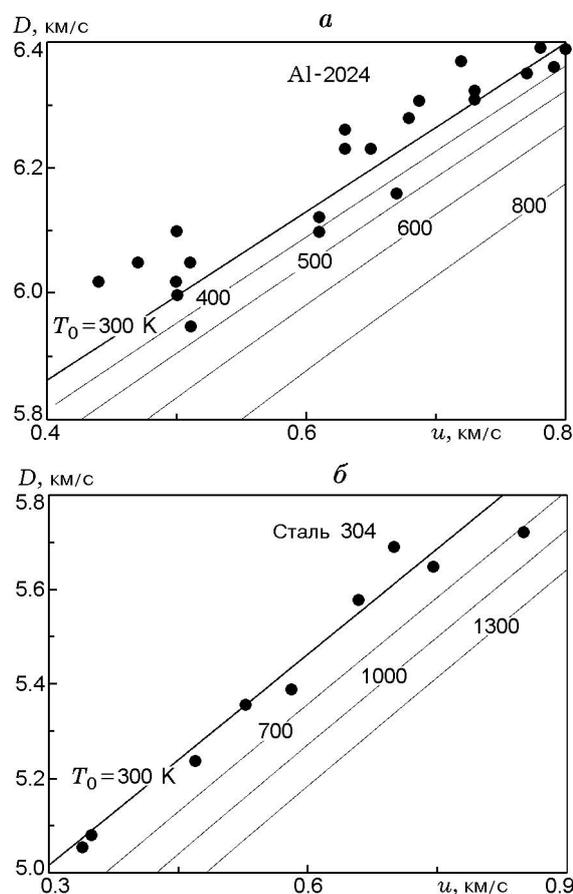


Рис. 1. Ударные адиабаты алюминиевого сплава Al-2024 (а) и нержавеющей стали 304 (отечественный аналог — аустенитная сталь 12Х18Н10Т) (б) при различной начальной температуре:

толстая линия — опорная ударная адиабата, тонкие линии — расчет по (2), (3); точки — экспериментальные данные [20]

начальной комнатной температуре и атмосферном давлении также приведены в табл. 1.

Разность $V_{01} - V_0$ при различных начальных температурах определялась по зависимости коэффициента объемного расширения от температуры из [19]. При этом для Al-2024 использовались данные для Al, для стали 304 — данные для отечественного аналога этой стали 12Х18Н10Т.

Отметим, что учет зависимости $\theta_e = \theta_e(V)$ по (6) приводит к незначительной (менее $\approx 0.5\%$) поправке начальной тепловой энергии. Поэтому в дальнейшем при использовании формулы (5) зависимостью $\theta_e(V)$ пренебрегли.

Рассчитанные по формуле (2) ударные

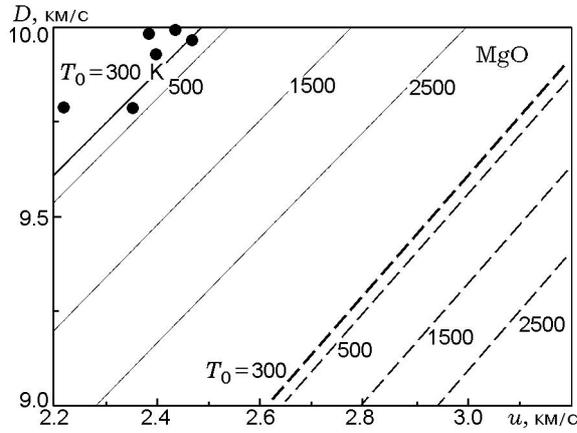


Рис. 2. Ударные адиабаты сплошных и пористых образцов периклаза при различной начальной температуре:

непрерывные линии — сплошные образцы: толстая — опорная ударная адиабата, тонкие — расчет по (2), (3); штриховые линии — пористые образцы ($m = 1.1$): толстая — опорная ударная адиабата, тонкие — расчет по (2), (3), (7), точки — экспериментальные данные [20]

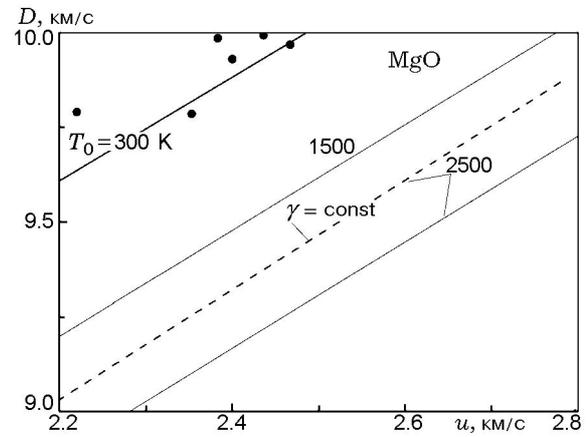


Рис. 3. Сопоставление ударных адиабат, вычисленных при различных зависимостях коэффициента Грюнайзена от объема (на примере периклаза):

штриховая линия — расчет по (2) при $T_0 = 2500$ К в приближении $\gamma = \text{const}$; сплошные линии — расчет при $\gamma = \gamma(V)$, остальные обозначения те же, что и на рис. 1, 2

Таблица 2

Зависимость коэффициентов ударной адиабаты предварительно нагретых образцов от их начальной температуры

Материал	α, K^{-1}	β, K^{-1}	T_0, K	$u, \text{км/с}$
Al-2024	11.7	15.3	300 ÷ 800	0.4 ÷ 1.5
Сталь 304	6.6	2.4	300 ÷ 1300	0.3 ÷ 1.5
MgO	6.2	3.1	300 ÷ 2500	0.8 ÷ 2.8

Примечание. α, β — коэффициенты эмпирических соотношений (9) и (10) соответственно; в графиках T_0, u приведены границы использования коэффициентов α, β .

адиабаты были преобразованы в координатах D, u по известным формулам физики ударного сжатия (рис. 1, 2). Эти ударные адиабаты имеют небольшую выпуклость вверх. Однако в диапазонах массовых скоростей, приведенных в табл. 2, ударные адиабаты можно представить обычным линейным соотношением

$$D(T_0) = c_0(T_0) + s(T_0)u. \quad (8)$$

При этом $c_0(T_0)$ и $s(T_0)$ также можно выразить линейными функциями:

$$c_0(T_0) = c_0(1 - \alpha \cdot 10^{-5}(T_0 - 300)), \quad (9)$$

$$s(T_0) = s_0(1 + \beta \cdot 10^{-5}(T_0 - 300)), \quad (10)$$

коэффициенты α и β приведены в табл. 2.

На рис. 2 показаны также расчеты по формуле (7) ударных адиабат пористого ($m = 1.1$) периклаза MgO при различных начальных температурах. Видно, что начальная температура приблизительно так же влияет на ударное сжатие нагретых пористых образцов, как и в случае монолитного материала.

Отметим, что предположение $\gamma = \gamma_0 = \text{const}$ приводит к ударным адиабатам, существенно отличающимся от расчетов с использованием формулы (3) (см. рис. 3). Использование в (2) соотношения $\gamma = \gamma_0 V/V_0$ вместо (3) дает практически совпадающие результаты для рассмотренных материалов. Представляется, однако, что и в этом случае предпочтение следует отдать формуле (3). Действительно, формула $\gamma = \gamma_0 V/V_0$ имеет неправильную асимптотику при малых значениях удельного объема. Поэтому в некоторой области сжатий, которую заранее указать затруднительно, это соотношение заведомо внесет погрешность в расчеты. Формула (3) лишена этого недостатка.

Заметим, что в данной работе область начальных температур ограничена повышенными температурами. Это ограничение связано с тем, что область применимости (2) обоснована экспериментальным примером лишь в диапазоне повышенных температур (см. [16] для мо-

либдена). Однако очевидно, что соотношение (2) формально может быть применено и для более низких температур.

Наконец, отметим, что полученные результаты позволяют рассчитывать изоэнтропы разгрузки, а также температуры вдоль ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки материалов с различными начальными температурами в рамках подхода, развитого в [12, 13]. Так, например, температура вдоль ударной адиабаты вычисляется численным интегрированием уравнения

$$\frac{dT}{dV} = -\gamma \frac{T}{V} + \frac{1}{C_V} \left(\frac{P}{2} + \frac{V_{01} - V}{2} \frac{dP}{dV} \right),$$

где P при объеме V на ударной адиабате задано выражением (2), $\gamma = \gamma(V)$ — соотношением (3), C_V — теплоемкость при постоянном объеме. Температура T_s вдоль изоэнтропы разгрузки, проходящей через точку ударной адиабаты (T_h, V_h) согласно [12, 13], с учетом (3) определяется формулой [21]

$$T_s = T_h \left(\frac{a - V/V_0}{a - V_h/V_0} \right)^2 \left(\frac{V_h}{V} \right)^{2/3}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано влияние начального нагрева на ударную адиабату металлических материалов (Al-2024 и нержавеющей стали 18-8) и ковалентного вещества — периклаза (MgO), а также на ударную адиабату пористого периклаза. Показано, что предварительный нагрев этих материалов изменяет их ударные адиабаты примерно на 0.01 %/К.

ЛИТЕРАТУРА

1. Johnson P. C., Stein B. A., Davis R. S. Temperature dependence of shock-induced phase transformations in iron // *J. Appl. Phys.* 1962. V. 33, N 2. P. 557–561.
2. Миндели Э. О., Мгеладзе З. И., Личели Г. П. и др. Влияние предварительного нагрева на упрочнение твердого сплава взрывом // *Физика горения и взрыва.* 1978. Т. 14, № 4. С. 102–107.
3. Ананьин А. В., Дремин А. Н., Канель Г. И. Полиморфное превращение железа в ударной волне // *Физика горения и взрыва.* 1981. Т. 17, № 3. С. 93–102.
4. Канель Г. И., Разоренов С. В., Овчинников А. А. Регистрация ударных волн мanganовыми датчиками и давления перехода графит-алмаз при повышенной температуре // *Детонация: Материалы II Всесоюз. совещ. по детонации.* Черногловка, 1981. Вып. II. С. 70–74.
5. Молодец А. М., Лебедев В. И., Дремин А. Н. Микроструктурные закономерности откольного разрушения железа // *Физика горения и взрыва.* 1989. Т. 25, № 4. С. 101–108.
6. Молодец А. М. Термомеханическое поведение стекла ЛК-105 в диапазоне высокоскоростных нагрузок -4 ГПа — $+4$ ГПа // *Хим. физика.* 1997. Т. 16, № 7. С. 113–119.
7. Канель Г. И., Разоренов С. В. Аномалии температурных зависимостей объемной и сдвиговой прочности монокристаллов алюминия в субмикросекундном диапазоне // *Физика твердого тела.* 2001. Т. 43, вып. 5. С. 841–845.
8. Arrieta H. V., Espinosa H. D. The role of thermal activation on dynamic stress-induced inelasticity and damage in Ti–6Al–4V // *Mech. Mater.* 2001. V. 33, N 10. P. 573–591.
9. Гурьев Д. Л., Гордополов Ю. А., Бацанов С. С. Химическая печь для предварительного разогрева в динамических экспериментах с сохранением // *Физика горения и взрыва.* 2005. Т. 41, № 1. С. 129–135.
10. Duffy T. S., Ahrens T. J. Dynamic response of molybdenum shock compressed at 1400 °C // *J. Appl. Phys.* 1994. V. 76, N 2. P. 838–842.
11. Трунин Р. Ф., Жерноклетов М. В., Кузнецов Н. Ф., Шутов В. В. Динамическая сжимаемость расплавленных и охлажденных металлов // *Теплофизика высоких температур.* 1995. Т. 33, № 2. С. 222–226.
12. Мак-Куин Р., Марш С., Тейлор Дж. и др. Уравнения состояния твердых тел по результатам исследования ударных волн // *Высокоскоростные ударные явления / Под ред. В. Н. Николаевского.* М.: Мир, 1973.
13. Зельдович Я. Б. Об использовании уравнений состояния с помощью механических измерений // *ЖЭТФ.* 1957. Т. 32, № 6. С. 1677–1578.
14. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений.* М.: Наука, 1968.
15. Molodets A. M. Similarity criteria for Debye temperatures of simple solids at compression // *High Pressure Res.* 2004. V. 24, N 3. P. 365–370.
16. Molodets A. M. Shock compression of preheated molybdenum // *High Pressure Res.* 2005. V. 25, N 3. P. 211–216.
17. Жирифалько Л. *Статистическая физика твердого тела.* М.: Мир, 1975.
18. Asay J. R., Shahinpoor M. *High-Pressure Shock Compression of Solids.* New York: Springer-Verlag, 1993.

-
19. **Физические** величины / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкин, А. М. Братковский и др. М.: Энергоатомиздат, 1991.
20. **Compendium of Shock Wave Data** / S. P. Marsh (Ed.). Berkeley: Univ. California Press, 1980.
21. **Молодец А. М.** Использование коэффициента Грюнейзена для расчета температуры вдоль изоэнтропы простых веществ // Физика горения и взрыва. 2001. Т. 37, № 4. С. 100–105.

Поступила в редакцию 11/V 2005 г.
