

УДК 536.71+532.539

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОПОРИСТЫХ СМЕСЕЙ НА ОСНОВЕ МЕДИ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

К. К. Маевский, С. А. Кинеловский

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия
E-mails: konstantin@hydro.nsc.ru, skin@hydro.nsc.ru

Для моделирования термодинамических параметров ударно-волнового нагружения как чистых материалов, так и смесей однородных и пористых материалов используется термодинамически равновесная модель, включающая модифицированное уравнение состояния, которое имеет только один подгоночный параметр, определяемый на основе экспериментальных данных. Проведен расчет термодинамических параметров при ударно-волновом нагружении меди и смесей, содержащих медь в качестве компонента, с пористостью, равной $1 \div 10$ при давлении более 5 ГПа. Проведено сравнение результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными (ударные адиабаты, двойное сжатие ударными волнами, оценка температуры). Показана возможность моделирования сжатия как смеси в целом, так и каждого компонента в отдельности.

Ключевые слова: уравнение состояния, ударная адиабата, термодинамическое равенство, пористая гетерогенная среда, медь.

DOI: 10.15372/PMTF20190403

Исследование поведения пористых смесей порошковых материалов при ударно-волновом нагружении необходимо для решения многих задач, чем обусловлено появление новых моделей для описания поведения смесей веществ (см., например, [1, 2]). Особый интерес представляет изучение смесей с большой пористостью, использование которых позволяет достигать высоких значений температуры. С учетом большого разнообразия смесей как по составу, так и по значению пористости для описания поведения порошковых смесей желательнее использовать уравнения состояния только компонентов смеси. Построение уравнений состояния ведется на протяжении многих лет, однако, учитывая сложность и разнообразие исследуемых материалов, работы в этом направлении продолжаются [3–5], при этом одной из актуальных задач является создание простых уравнений состояния с малым числом параметров [6–8]. Для моделирования термодинамических параметров смесей необходима достаточно простая модель, позволяющая получить хорошее соответствие с экспериментом в широком диапазоне значений давления как для однородных, так и для пористых материалов.

Методика расчета. Численное моделирование термодинамических параметров ударно-волнового нагружения чистых материалов и смесей основано на предположении, что все компоненты смеси, включая газ в порах, при ударно-волновом нагружении находятся в термодинамическом равновесии, т. е. массовые скорости, давления и температуры всех компонентов равны. Данный подход используется в работах [9–12]. При этом

чистые материалы рассматриваются как смесь с одним конденсированным компонентом. Для описания поведения конденсированных фаз используются уравнения состояния типа уравнений Ми — Грюнайзена. Уравнения состояния для конденсированного компонента имеют вид

$$\begin{aligned} P(\rho, T) &= P_C(\rho) + P_T(T), & E(\rho, T) &= E_C(\rho) + E_T(T), \\ P_T(\rho, T) &= \Gamma\rho E_T(T), & E_T(T) &= c_V(T - T_0), \end{aligned}$$

где P_C , E_C — потенциальные компоненты давления и удельной энергии; P_T , E_T — тепловые компоненты давления и удельной энергии; c_V — теплоемкость; T_0 — начальная температура. Поскольку данная модель применяется для значений давления $P > 5$ ГПа, начальной энергией E_0 вещества при нормальных условиях пренебрегается. Холодная составляющая давления P_C описывается уравнением типа уравнения Гэта. Тогда термические и калорические уравнения состояния для конденсированного компонента с текущей ρ и начальной ρ_0 плотностью имеют вид

$$\begin{aligned} P(\rho, T) &= A \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right) + \Gamma c_V (T - T_0) \rho, \\ E(\rho, T) &= \frac{A}{\rho_0} \left(\frac{1}{n-1} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{n-1} + \frac{\rho_0}{\rho} - \frac{n}{n-1} \right) + c_V (T - T_0). \end{aligned}$$

Простота и удобство обусловили широкое использование этих уравнений [13], поскольку для каждого вещества помимо параметра Γ либо взаимосвязанной с ним величины предельного сжатия $h = 1 + 2/\Gamma$ они содержат только две константы A и n ($A = \rho_0 c_0^2/n$; c_0 — скорость звука в нормальных условиях).

Для уменьшения количества подгоночных параметров, используемых в уравнении состояния термодинамически равновесной (ТЕС) модели, проведена частичная модификация. Значение $n = K'$ определяется по аналогии с уравнением Мурнагана [14] как производная модуля объемной упругости $K' = (\partial K/\partial p)_T$ при начальных условиях ($K = \rho(\partial P/\partial \rho)_T$). Таким образом, остается определить функцию $\Gamma = P_T V/E_T$, характеризующую вклад тепловых компонент.

После проведенного анализа экспериментальных данных как для монолитных, так и для пористых материалов предложена эмпирическая зависимость от температуры $\Gamma(T)$, использовавшаяся при разработке уравнения состояния для модели ТЕС [9–12]. Параметры выбирались из условия соответствия расчетных ударных адиабат известным экспериментальным результатам для каждого материала. В итоге добавлялись три свободных параметра. Для ряда материалов, в том числе для меди, известны значения параметра Γ для нормальных условий и для величины сжатия 1,67 [15]. Использование этого параметра позволяет определить функцию $\Gamma(T)$ таким образом, что остается найти только один параметр на основе данных, полученных экспериментально. Зависимость $\Gamma(T)$ определяется в виде

$$\Gamma(T) = b \frac{1 + a_1 \tau}{1 + a_2 \tau},$$

где $\tau = T/T_0$ — относительная температура; T_0 — температура при нормальных условиях; параметры a_1 , a_2 , b определяются таким образом, что $\Gamma(T_0)$ соответствует известному значению при нормальных условиях, значение Γ для величины сжатия 1,67 принимает значение Γ_* [15]. Подбирается только значение Γ_m , которое позволяет описывать имеющиеся экспериментальные данные при максимальных значениях давления. Получаем уравнение состояния с одним подгоночным параметром, определяемым на основе экспериментальных данных, в следующем виде:

$$P(\rho, T) = \frac{\rho_0 c_0^2}{n} \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right) + c_V \rho T_0 (\tau - 1) b \frac{1 + a_1 \tau}{1 + a_2 \tau}.$$

Используются условия динамической совместности на фронте волны: условия сохранения потока массы для каждого компонента смеси и сохранения потоков импульса и энергии для смеси в целом. Полученных уравнений в совокупности с уравнением состояния каждого компонента достаточно для определения зависимостей типа $P(U)$ или $D(U)$ (P , U , D — давление, массовая и волновая скорости), которые можно трактовать как ударную адиабату многокомпонентной смеси. Для смеси, в состав которой входят n конденсированных компонентов, имеющих начальные объемные доли μ_{i0} , получены следующие выражения:

$$P = \sum_{i=1}^n A_i \frac{\mu_{i0}}{\sigma_i} \left[\left(h_i - \frac{k_i + 1}{k_i - 1} \right) \sigma_i^{k_i} + \frac{2k_i \sigma_i}{k_i - 1} - h_i - 1 \right] / \left[\sum_{i=1}^n \frac{\mu_{i0}}{\sigma_i} h_i + \frac{h_g}{\sigma_g} \left(1 - \sum_{i=1}^n \mu_{i0} \right) - 1 \right],$$

$$h_i = \frac{2}{\Gamma_i} + 1, \quad h_g = \frac{2}{\gamma - 1} + 1.$$

Здесь $\sigma_i = \rho_i / \rho_{i0}$; $\sigma_g = \rho_g / \rho_{g0}$ — степени сжатия соответствующего компонента $i = 1, \dots, n$; ρ_g , ρ_{g0} — текущая и начальная плотности газа; γ — показатель адиабаты. Для газа используется уравнение состояния идеального газа $P = (\gamma - 1) \rho_g c_g (T - T_0)$, где c_g — теплоемкость газа, соответствующая теплоемкости воздуха. Следует отметить, что указанный подход позволяет рассчитывать сжатие не только смеси, но и каждого ее компонента.

Моделирование ударно-волнового нагружения. Для использования уравнения состояния в модели ТЕС необходимы семь констант, четыре из которых берутся из справочников и соответствуют значениям величин при нормальных условиях ρ_0 , cv , c_0 , Γ_0 , а три константы n , Γ_m , Γ_* , позволяющие описывать экспериментальные данные при средних значениях давления, выбираются из условия соответствия расчетных и экспериментальных данных. В модифицированном уравнении состояния также требуется семь параметров, однако подбирается только один Γ_m . Параметры, используемые в модели [9–12] и для модифицированного уравнения состояния, различаются незначительно, что приводит к различиям значений температуры порядка 1 %. Таким образом, можно предположить, что уменьшение количества подгоночных параметров существенно не снизит достоверность описания экспериментальных данных по сравнению с моделью ТЕС.

Сравнение результатов расчета значений температуры для сплошной меди на ударной адиабате по модели QEOS [16] и модели, рассматриваемой в настоящей работе, показывает, что последняя позволяет получать более близкие к экспериментальным значения температуры при ударно-волновом сжатии, чем модель [16]. При $P \leq 200$ ГПа погрешность составляет не более 1 %. При $200 \text{ ГПа} \leq P \leq 500 \text{ ГПа}$ погрешность увеличивается до 9 %, вследствие того что в данной модели не учитывается плавление, и это приводит к завышению значений температуры. Так же влияет выбор зависимости тепловой энергии $E_T(T)$ от температуры. Однако в [17] отмечалось, что при больших значениях T зависимость $E_T(T)$ близка к линейной, поэтому в данном случае предположение о том, что теплоемкость является постоянной, можно считать оправданным. При давлении $P = 1200$ ГПа в [18] на основе расчетов по модели [19] получено значение температуры 70 000 К. Значение температуры для данного давления, определенное по модели ТЕС с обеими версиями уравнения состояния, отличается не более чем на 1 % от приведенного в [18]. Значения температуры, вычисленные по модели ТЕС, а также данные экспериментов и расчетов по другим моделям приведены в [20, 21]. Поскольку значения температуры, определенные по уравнению состояния в модели ТЕС и по модифицированному уравнению состояния, близки, в случае отсутствия необходимых данных для модифицированного уравнения состояния можно использовать методику и параметры, определенные в [9–12], и получить при этом достаточно достоверные результаты.

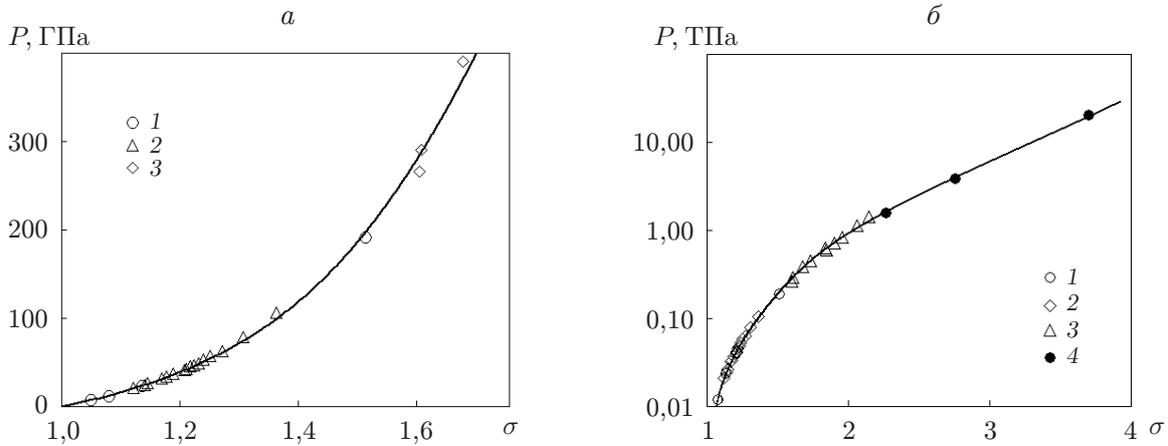


Рис. 1. Ударная адиабата для меди для различных значений давления и сжатия: линии — расчет по модифицированной модели ТЕС, точки — данные эксперимента; *a* — $P \leq 400$ ГПа (1 — [23], 2 — [24], 3 — [25]), *б* — $0,01$ ТПа $\leq P \leq 10,00$ ТПа (1 — [25], 2 — [24], 3 — [26], 4 — [27])

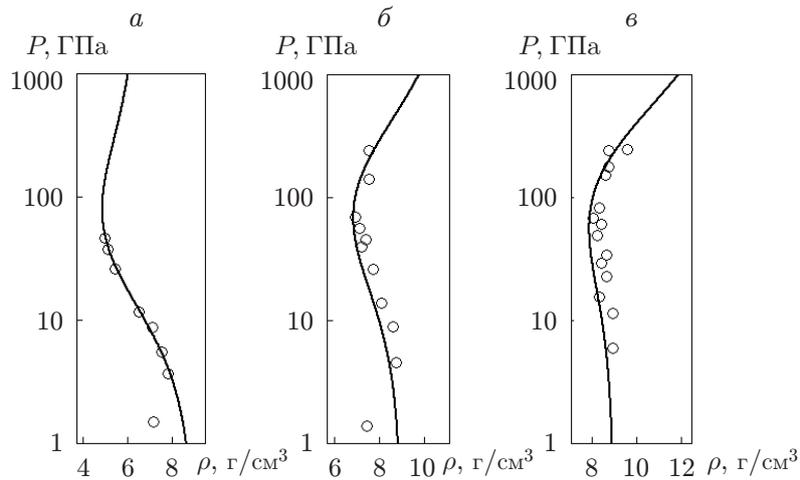


Рис. 2. Ударные адиабаты для пористой меди при различных значениях пористости: *a* — $m = 7,2$, *б* — $m = 4,0$, *в* — $m = 3,0$; линии — расчет по модифицированной модели, точки — данные эксперимента [22]

В [22] приведены данные, полученные в экспериментах, для меди с различными значениями пористости (1 ÷ 10). Результаты моделирования термодинамических параметров для меди с плотностью $\rho_0 = 8,93$ г/см³ и данные, полученные на основе экспериментов [22], показаны на рис. 1. Расчетная ударная адиабата для сплошной меди при $P \leq 400$ ГПа приведена на рис. 1, *a*, для больших значений давления (400 ГПа $< P \leq 20$ ТПа) результаты моделирования показаны на рис. 1, *б*. Получено хорошее соответствие результатов расчета по модифицированной модели ТЕС экспериментальным данным.

Полученные результаты позволяют достоверно моделировать термодинамические параметры пористых образцов меди. Расчетные кривые и экспериментальные данные для меди с пористостью $m = 3,0; 4,0; 7,2$ в координатах плотность — давление показаны на рис. 2.

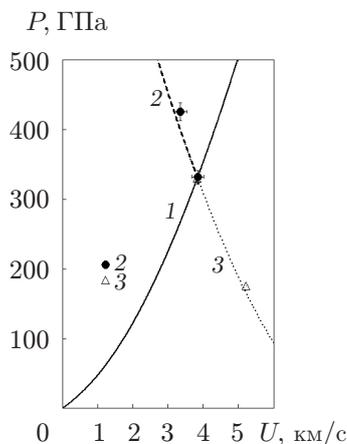


Рис. 3

Рис. 3. Ударная адиабата для меди (1), двукратное сжатие ударными волнами (2), адиабатическая разгрузка (3) в координатах массовая скорость — давление:

линии — расчет, точки — экспериментальные данные [29]

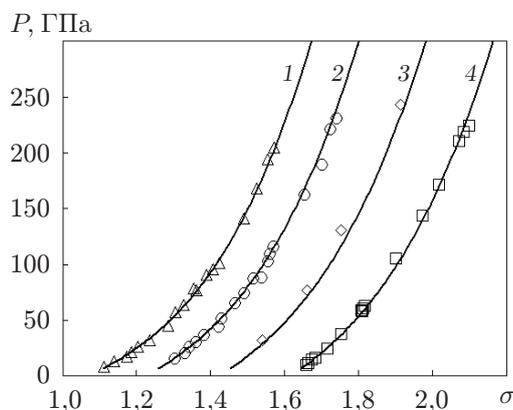


Рис. 4

Рис. 4. Ударные адиабаты (линии) и данные эксперимента [26] (точки) для смеси вольфрама и меди при различных значениях пористости:

1 — $m = 1,014$, 2 — $m = 1,0195$, 3 — $m = 1,022$, 4 — $m = 1,068$

Для определения термодинамических свойств веществ при значениях плотностей, превышающих плотность, соответствующую однократному сжатию, разработаны способы регистрации состояний, возникающих при повторном ударном сжатии [28]. Модифицированная модель ТЕС позволяет описывать результаты, полученные в экспериментах по двойному сжатию вещества. На рис. 3 показаны результаты расчета параметров двойного сжатия для меди и адиабатической разгрузки из одной и той же точки. При начальной точке на ударной адиабате, соответствующей значению $P = 331,5$ ГПа, получаем точку двукратного (повторного) сжатия при $P = 425,8$ ГПа с погрешностью не более 3 % по давлению и 2,5 % по скорости.

Расчеты высокопористых смесей. Учет пористости в рассматриваемой модели для смеси меди и вольфрама (элконита) [26] позволяет достоверно описать имеющиеся экспериментальные данные без существенных погрешностей для всех значений пористости элконита. На рис. 4 представлены ударные адиабаты для этой смеси. Расчетные кривые и данные, полученные в экспериментах, приведены со сдвигом по оси σ с шагом, равным 0,2.

Результаты расчетов для пористой смеси медь — углерод (алмаз), приведенные на рис. 5, хорошо согласуются с результатами экспериментов [17]. Расчеты проводились при средних значениях пористости в диапазонах $m = 1,193 \div 1,235$, $m = 1,615 \div 1,689$, вследствие чего различие экспериментальных и расчетных данных увеличивается.

На рис. 6,а показаны результаты моделирования, полученные при $m = 10$ для смеси меди и вольфрама следующих составов: 50 % Cu — 50 % W (плотность $\rho = 1,409$ г/см³); 90 % Cu — 10 % W ($\rho = 0,997$ г/см³). Также на рис. 6,а приведены результаты расчетов параметров ударно-волнового сжатия меди и данные, полученные в экспериментах для меди ($m = 10$, $\rho = 0,894$ г/см³). На рис. 6,б приведены расчетные значения температуры при ударно-волновом нагружении тех же материалов.

Анализ результатов, полученных в [20], позволяет сделать вывод о возможности целенаправленно изменять значения давления и температуры ударно-волнового нагружения,

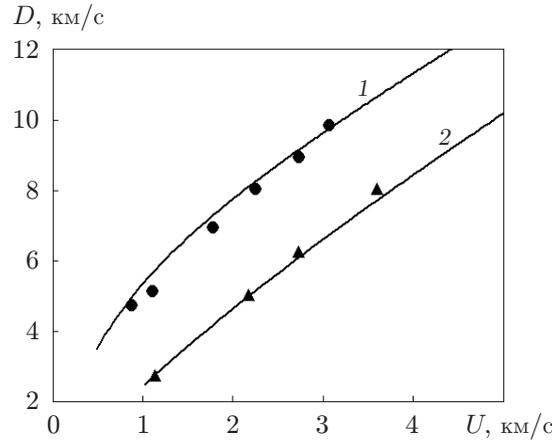


Рис. 5. Ударные адиабаты (линии) и данные эксперимента [17] (точки) для смеси меди и углерода (алмаза) при различных значениях пористости: 1 — $m = 1,212$; 2 — $m = 1,626$

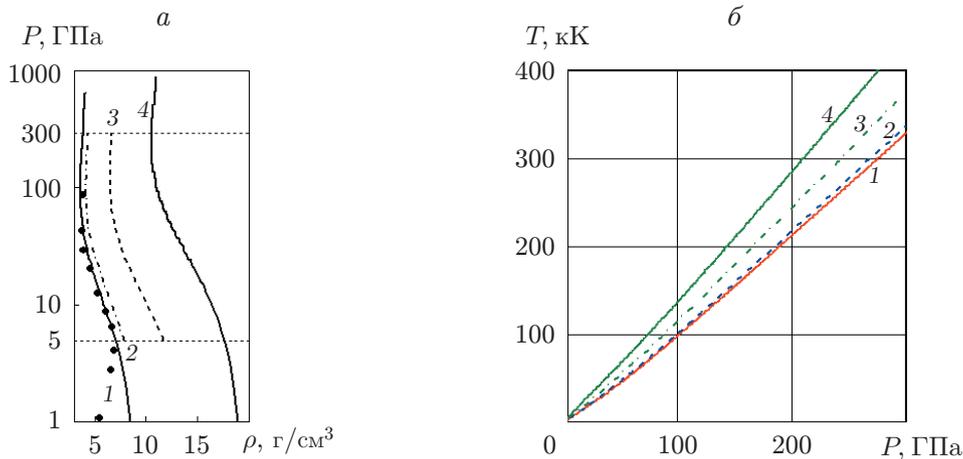


Рис. 6. Ударная адиабата (а) и температура на ней (б) при $m = 10$: линии — расчет, точки — экспериментальные данные [30]; 1 — Cu, 2 — смесь 90 % Cu — 10 % W, 3 — смесь 50 % Cu — 50 % W, 4 — W

меняя состав смеси. Например, смесь меди и вольфрама (90 % Cu — 10 % W) и смесь меди, вольфрама и алюминия (50 % Cu — 25 % W — 25 % Al) близки по плотности, однако расчетные значения температуры для этих смесей существенно различаются. Это означает, что можно определять составы смесей, которые позволяют при одном и том же значении давления существенно увеличить температуру получаемой смеси, практически не меняя общую массу металла.

Как отмечалось в [10], модель ТЕС позволяет не только рассчитывать сжатие смеси, но и моделировать сжатие каждого ее компонента. На рис. 7, 8 показаны результаты расчетов ударно-волнового сжатия высокопористых смесей ($m = 10$) из двух и трех компонентов (сжатие смеси в целом и каждого ее компонента в отдельности). Видно, что при увеличении давления у различных компонентов может изменяться не только величина сжатия, но и ее знак.

Заключение. Модель ударно-волнового нагружения пористых материалов позволяет проводить достоверные расчеты для чистых материалов и смесей с большими значениями

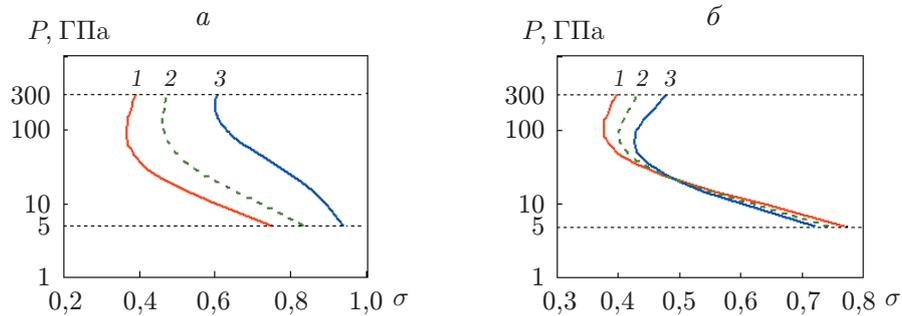


Рис. 7. Расчетные зависимости давления от величины сжатия при $m = 10$ для двухкомпонентных смесей Cu–W (а) и Cu–Al (б) и каждого их компонента: а — 1 — Cu, 2 — 50 % Cu — 50 % W, 3 — W; б — 1 — Al, 2 — 50 % Cu — 50 % Al, 3 — Cu

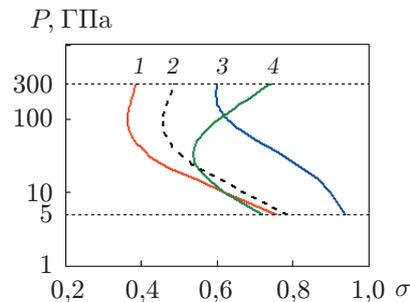


Рис. 8. Расчетные зависимости давления от величины сжатия при $m = 10$ для трехкомпонентной смеси и каждого ее компонента: 1 — Cu, 2 — 50 % Cu — 25 % W — 25 % Al, 3 — W, 4 — Al

пористости. Сравнение результатов расчетов с известными результатами экспериментов и расчетов показывает, что рассматриваемая в данной работе модель динамического нагружения пористых материалов адекватно описывает известные экспериментальные данные для различных материалов с высокой пористостью в диапазоне значений давления больше 5 ГПа. При этом модель позволяет оценивать термодинамические параметры каждого компонента смеси при ударно-волновом нагружении. Данная модель с модифицированным уравнением состояния может использоваться при определении состава смеси для получения необходимых значений термодинамических параметров при ударно-волновом нагружении.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шуршалов Л. В., Чарахчян А. А., Хищенко К. В. Численный эксперимент по ударному сжатию смеси графита с водой // Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53, № 4. С. 114–121.
2. Nayak B., Menon S. V. G. Non-equilibrium theory employing enthalpy-based equation of state for binary solid and porous mixtures // Shock Waves. 2018. V. 28, iss. 2. P. 141–151.
3. Медведев А. Б. Уравнение состояния диоксида кремния с учетом испарения, диссоциации и ионизации // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52, № 4. С. 101–114.
4. Каякин А. А., Гударенко Л. Ф., Гордеев Д. Г. Уравнение состояния соединений изотопов лития с изотопами водорода // Физика горения и взрыва. 2014. Т. 50, № 5. С. 109–122.

5. **Ломоносов И. В., Фортова С. В.** Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55, № 4. С. 596–626.
6. **Kraus E. I., Shabalin I. I.** Calculation of elastic modules behind strong shock wave // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 774. 012009.
7. **Гилев С. Д.** Малопараметрическое уравнение меди // Физика горения и взрыва. 2018. Т. 54, № 4. С. 107–122.
8. **Khishchenko K. V.** Equation of state for magnesium hydride under condition of shock loading // Math. Montisnigri. 2018. V. 43. P. 70–77.
9. **Кинеловский С. А., Маевский К. К.** Модель поведения смеси с различными свойствами компонентов при высокой концентрации энергии // ПМТФ. 2013. Т. 54, № 4. С. 13–21.
10. **Кинеловский С. А., Маевский К. К.** Модель поведения алюминия и смесей на его основе при ударно-волновом воздействии // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52, № 6. С. 843–851.
11. **Кинеловский С. А., Маевский К. К.** Моделирование ударно-волнового нагружения многокомпонентных материалов, включающих в свой состав висмут // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54, № 5. С. 716–723.
12. **Кинеловский С. А., Маевский К. К.** Простая модель расчета ударных адиабат порошковых смесей // Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47, № 6. С. 101–109.
13. **Голубев В. К.** Определение диапазона применимости для уравнения состояния металлов с постоянным коэффициентом Грюнайзена // Хим. физика. 2002. Т. 21, № 10. С. 30–35.
14. **Vaidya S. N., Kennedy G. C.** Compressibility of 18 metals to 45 kbar // J. Phys. Chem. Solids. 1970. V. 3. P. 2329–2345.
15. **Бабичев А. П.** Физические величины / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский и др. М.: Энергоатомиздат, 1991.
16. **Nellis W. J., Mitchell A. C., Young D. A.** Equation-of-state measurements for aluminum, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar) // J. Appl. Phys. 2003. V. 93, N 1. P. 304–310.
17. **Трунин Р. Ф.** Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ / Р. Ф. Трунин, Л. Ф. Гударенко, М. В. Жерноклетов, Г. В. Симаков. Саров: Всерос. науч.-исслед. ин-т эксперим. физики, 2006.
18. **Ударные волны и экстремальные состояния вещества** / Под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. М.: Наука, 2000.
19. **Медведев А. Б.** Модель уравнения состояния с учетом испарения, ионизации и плавления // Вопр. атом. науки и техники. Сер. Теорет. и прикл. физика. 1992. Вып. 1. С. 12–19.
20. **Кинеловский С. А., Маевский К. К.** Оценка термодинамических параметров ударно-волнового воздействия на высокопористые гетерогенные материалы // Журн. техн. физики. 2016. Т. 86, вып. 8. С. 125–130.
21. **Маевский К. К., Кинеловский С. А.** Термодинамические параметры смесей с нитридом кремния при ударно-волновом воздействии в представлениях равновесной модели // Теплофизика высоких температур. 2018. Т. 56, № 6. С. 932–938.
22. **Levashov P. R., Khishchenko K. V., Lomonosov I. V., Fortov V. E.** Database on shockwave experiments and equations of state available via internet // Shock compression of condensed matter — 2003 / Ed. by M. D. Furnish, Y. M. Gupta, J. W. Forbes. Melville; N. Y.: AIP, 2004. P. 87–90.
23. **Трунин Р. Ф.** Исследования экстремальных состояний конденсированных веществ методом ударных волн. Уравнения Гюгонио. Саров: Всерос. науч.-исслед. ин-т эксперим. физики, 2006.

24. **Жугин Ю. Н., Крупников К. К., Овечкин Н. А. и др.** О некоторых особенностях динамической сжимаемости кварца // Физика Земли. 1994. № 10. С. 16–22.
25. **Глушак Б. Л., Жарков А. П., Жерноклетов М. В. и др.** Экспериментальное изучение термодинамики плотной плазмы металлов при высоких концентрациях энергии // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1989. Т. 96, вып. 4. С. 1301–1318.
26. **LASL Shock Hugoniot Data** / Ed. by S. P. Marsh. Berkeley: Univ. California Press, 1980.
27. **Трунин Р. Ф.** Ударная сжимаемость конденсированных веществ в мощных ударных волнах подземных ядерных взрывов // Успехи физ. наук. 1994. Т. 164, № 11. С. 1215–1237.
28. **Методы исследования свойств материалов при интенсивных динамических нагрузках** / Под ред. М. И. Жерноклетова. Саров: Всерос. науч.-исслед. ин-т эксперим. физики, 2003.
29. **Nellis W. J., Mitchell A. C., Young D. A.** Equation-of-state measurements for aluminum, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar) // J. Appl. Phys. 2003. V. 93, N 1. P. 304–310.
30. **Грязнов В. К., Жерноклетов М. В., Иосилевский И. Л. и др.** Ударно-волновое сжатие сильнонеидеальной плазмы металлов и ее термодинамика // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1998. Т. 114, вып. 4. С. 1242–1265.

*Поступила в редакцию 1/X 2018 г.,
после доработки — 13/II 2019 г.
Принята к публикации 25/II 2019 г.*
