

приведены на фиг. 6 ($v_0 = 75$ м/с). Даже при малых углах конусности время отскока существенно отличается от времени отскока цилиндрического стержня. Это явление связано с процессом кумуляции упругой волны нагрузки и разгрузки из-за изменения площади сечения и их взаимодействия с падающей пластической волной. При этом следует заметить, что и импульс действия у конического стержня ($L_0 = 3$ см, $R_0 = 0,3$ см, $R_1 = 0,335$ см) будет больше, чем у цилиндрического. Этот факт интересен еще тем, что одну и ту же кинетическую энергию можно по-разному перевести в пластическое деформирование в зависимости от возбуждаемого волнового процесса в среде.

Поступила 10 V 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Ленский В. С. Об упругопластическом ударе стержня о жесткую преграду.— ПММ, 1949, т. 13, № 2.
2. Рахматулин Х. А., Демьянов Ю. А. Прочность при интенсивных кратковременных нагрузках. М., Физматгиз, 1961.
3. Баренблат Г. И., Ишлинский А. Ю. Об ударе вязкопластического стержня о жесткую преграду.— ПММ, 1962, т. 26, № 3.
4. Уилкинс М. Л., Гуинан М. У. Удар цилиндра по жесткой преграде.— Сб. пер. Механика, 1973, № 3.
5. Коротких Ю. Г., Белевич С. М. Некоторые результаты численного исследования процесса соударения стержня с жесткой преградой.— В кн.: Методы решения задач упругости и пластичности. Горький, 1972.
6. Bertholf L. D., Karnes C. H. Axisymmetric elastic-plastic wave propagation in 6061-T6 aluminum bars of finite length.— Trans. ASME, ser. D, 1969, N 3.
7. Веклич Н. А., Кукуджанов В. Н., Малышев Б. М. О продолжительности упругопластического удара по стержню. Тезисы докладов IV симпозиума по распространению волн. Кишинев, Наука, 1968.
8. Веклич Н. А. О распространении и взаимодействии упругопластических волн в стержне при ударе о преграду.— Изв. АН СССР. МТТ, 1970, № 4.
9. Веклич Н. А., Малышев Б. М. Продолжительность удара упругопластического стержня.— Изв. АН СССР. МТТ, 1976, № 2.
10. Кукуджанов В. Н. Одномерные задачи распространения волн напряжения в стержнях.— Труды ВЦ АН СССР, 1977, вып. 7.
11. Уилкинс М. Л. Расчет упругопластических течений.— В кн.: Вычислительные методы в гидродинамике. М., Мир, 1967.
12. Станюкович К. П. и др. Физика взрыва. М., Наука, 1975.

УДК 539.24

УДАРНЫЕ АДИАБАТЫ ОКИСЛОВ ЩЕЛОЧНО-ЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

А. А. Вааль, А. В. Жуков, В. Ф. Конусов

(Томск)

Расчет ударных адиабат ионных кристаллов (щелочно-галогенидных соединений, окислов) является необходимым звеном в переходе к рассмотрению поведения при ударном сжатии многих неорганических материалов (минералов, горных пород) [1—3]. Параметры ударного сжатия большинства щелочно-галогенидных кристаллов хорошо определены как экспериментально [4], так и теоретически [5, 6]. Менее исследовано поведение окислов в условиях ударного нагружения. В данной работе на основе предлагаемой полуэмпирической функции энергии связи, учитывающей парные и тройные взаимодействия ионов, проводится расчет ударных адиабат окислов щелочно-земельных металлов MgO, CaO, SrO, BaO в фазах B1 (решетка NaCl) и B2 (решетка CsCl).

Ударная адиабата $P_H(V)$ рассчитывается по формуле [7]

$$(1) \quad P_H(V) = \frac{P_x(V) + \gamma(V) [E_0 - U(V)]/V}{1 + \gamma(V) [V - V_0]/2V},$$

где $U(V)$, $P_x(V)$ — энергия и давление на нулевой изотерме; $\gamma(V)$ — коэффициент Грюнайзена; V_0 , E_0 — объем и внутренняя энергия свободного кристалла. Использование квантовомеханического метода расчета $U(V)$ [5], основанного на парном приближении о силах связи, в оксидах менее оправдано, чем в щелочно-галогидных кристаллах, поскольку в них наблюдаются существенные отклонения от соотношений Коши между модулями упругости второго порядка. Эти отклонения в первую очередь обуславливаются трехчастичными взаимодействиями.

Функция энергии связи кристалла, образованного частицами разных сортов, с учетом трехчастичных взаимодействий имеет вид

$$(2) \quad U = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l'l'' \\ kk'}} \varphi(r^{ll'kk'}) + \frac{1}{6} \sum_{\substack{l'l'' \\ kk'k''}} \psi(r^{ll'kk'}, r^{l''lk''k}, r^{l'l''k''k'}),$$

где $r^{ll'kk'}$ — расстояние между частицами сорта k и k' , находящимися в элементарных ячейках; l и l' , φ , ψ — соответственно потенциалы парных и трехчастичных взаимодействий. Парные взаимодействия аппроксимируем потенциалом Борна — Майера

$$\varphi(r) = \frac{e_k e_{k'}}{r} + A_{kk'} \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) - \frac{c_{kk'}}{r^6} - \frac{d_{kk'}}{r^8},$$

где e_k , $e_{k'}$ — заряды ионов; $c_{kk'}$, $d_{kk'}$ — соответственно константы диполь-дипольного и диполь-квадрупольного взаимодействия, значения которых для оксидов приведены в [8]; $A_{kk'}$, ρ — параметры. Для аппроксимации тройных взаимодействий применялся потенциал, функциональная форма которого предложена в [9]

$$\psi = B_{kk'k''} \exp\left(-\frac{r^{ll'kk'} + r^{l''lk''k} + r^{l'l''k''k'}}{3\rho}\right),$$

где $B_{kk'k''}$ — параметры, а ρ имеет то же численное значение, что и в парном потенциале. При суммировании по кристаллической решетке в последнем члене (2) учитывались триплеты ионов, образованные двумя ионами одного знака и одним ионом противоположного знака. Конфигурация таких триплетов для решетки NaCl (окислы щелочно-земельных металлов при нормальных условиях имеют этот тип структуры) представляет собой равнобедренный прямоугольный треугольник, две стороны которого равны кратчайшему расстоянию R между ионами, а третья сторона равна $\sqrt{2}R$. Для определения четырех неизвестных параметров функции энергии связи использовались экспериментальные характеристики свободных оксидов: энергия связи, равновесный объем [8] и модули упругости второго порядка [10—13].

Уравнения состояния гидростатического сжатия оксидов щелочно-земельных металлов в фазах В1 и В2, рассчитанные на основе полученной функции энергии связи, хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными [14—16]. Для расчета ударных адиабат коэффици-

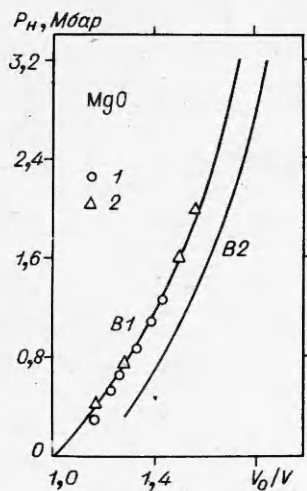
Таблица 1

Кристалл	$\gamma(V_0)$			Эксперимент [12]
	СЛ	ДМ	ЗВ	
MgO	1,58	1,25	0,92	1,54
CaO	1,78	1,45	1,12	1,19
SrO	1,79	1,46	1,13	1,11
BaO	1,87	1,54	1,21	—

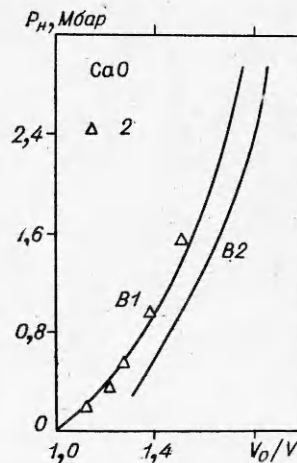
Т а б л и ц а 2

Кристалл	Фаза В1			Фаза В2		
	V_0/V	P_{λ} , кбар	P_H , кбар	V_0/V	P_{λ} , кбар	P_H , кбар
MgO	1,17	372	376	1,61	1619	1686
	1,20	473	481	1,72	2117	2431
	1,28	708	733	1,78	2404	2904
	1,32	845	884	1,84	2720	3464
	1,51	1554	1730	1,91	3068	4133
	1,75	2603	2809	1,97	3450	4942
	1,88	3299	4378	2,04	3870	5932
CaO	1,17	310	313	1,51	866	918
	1,20	397	403	1,56	1025	1122
	1,28	604	622	1,61	1203	1359
	1,32	726	755	1,72	1620	1956
	1,42	1015	1081	1,84	2136	2773
	1,57	1586	1770	1,97	2771	3916
	1,88	3044	3866	2,04	3141	4660
SrO	1,17	233	236	1,46	540	559
	1,20	298	304	1,51	648	695
	1,28	455	469	1,61	903	1033
	1,37	651	685	1,72	1222	1490
	1,46	895	968	1,84	1615	2120
	1,68	1575	1840	1,97	2102	3005
	1,88	2309	2943	2,04	2386	3582
BaO	1,17	198	201	1,38	260	267
	1,20	254	259	1,46	408	449
	1,28	390	404	1,56	594	696
	1,37	562	596	1,67	829	1033
	1,46	779	851	1,78	1121	1502
	1,68	1391	1661	1,90	1485	2165
	1,88	2061	2726	2,04	1936	3135

енты Грюнайзена $\gamma(V)$ вычислялись по формулам Слэйттера — Ландау (СЛ), Дугдейла — Макдональда (ДМ), Зубарева — Ващенко (ЗВ). Хорошее согласие рассчитанных значений $\gamma(V_0)$ с экспериментом для MgO получается при расчете по СЛ, а для CaO, SrO по ЗВ. Экспериментальные значения $\gamma(V_0)$ для BaO нам неизвестны. Рассчитанные значения $\gamma(V_0)$ приведены в табл. 1. Расчет ударных адиабат для фазы В2 проводился по (1) с параметрами начального состояния решетки В1 и с $U(V)$, $P_x(V)$, $\gamma(V)$, относящимися к фазе В2. В случае MgO давление ударного сжатия $P_H(V)$ рассчитывалось с использованием $\gamma(V)$ по СЛ, а для CaO, SrO, BaO — по ЗВ. В табл. 2 приведены рассчитанные давления на нулевой изотерме $P_x(V)$ и давление ударного сжатия $P_H(V)$ окислов как функции относительного сжатия V_0/V . На фиг. 1—3 представлены полученные ударные адиабаты MgO, CaO, BaO (экспериментальные данные: 1 — из [17]; 2 — из [1]; 3 — из [15]). В случае MgO и CaO экспериментальные точки из [1, 17] хорошо согласуются с рассчитанной кривой $P_H(V)$ фазы В1; переход к плотной фазе В2 экспериментально не установлен. В случае BaO фазовый переход имеет место в области низких давлений [3, 15]. Рассчитанные ударные адиабаты решеток В1 и В2 для BaO в вышеупомянутой области близки к экспериментальным точкам, относящимся к статическому сжатию [15]. Экспериментальные данные по ударному сжатию SrO в литературе отсутствуют. Хорошее согласие с опытом $P_x(V)$ и $\gamma(V_0)$, а также ис-



Ф и г. 1



Ф и г. 2

пользование при определении параметров функции энергии связи экспериментальных характеристик свободного состояния позволяют надеяться, что, как и для MgO , CaO , рассчитанные ударные адиабаты SrO достаточно правильно описывают действительное поведение этого кристалла в условиях ударного сжатия.

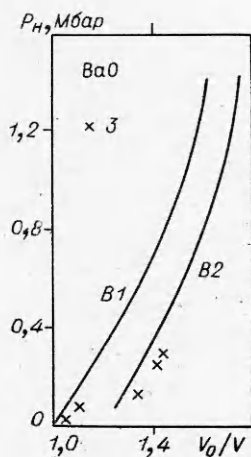
Полученные ударные адиабаты рассматриваемых кристаллов позволяют рассчитать соотношения между скоростью ударной волны D и массовой скоростью u . Для расчета были использованы следующие из законов сохранения соотношения

$$D(v) = v_0 \sqrt{P_H/(v_0 - v)}, \quad u(v) = \sqrt{P_H(v_0 - v)},$$

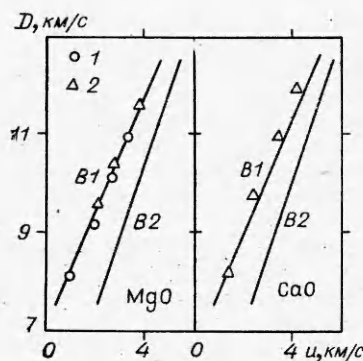
в которых P_H и v (удельный объем) взяты из наших расчетов. Связь между D и u в широком интервале скоростей интерполируется функцией вида

$$(3) \quad D = a + bu.$$

В табл. 3 приведены параметры a и b , найденные из рассчитанных скоростей D и u по методу наименьших квадратов для фазы B1 и B2 оксидов.



Ф и г. 3



Ф и г. 4.

Таблица 3

Кристалл	Фаза В1		Фаза В2	
	a, км/с	b	a, км/с	b
MgO	7,25	1,17	5,10	1,71
CaO	6,30	1,26	4,63	1,63
SrO	3,97	1,27	2,61	1,59
BaO	2,68	1,27	2,62	1,54

На фиг. 4 показано расположение экспериментальных точек по отношению к рассчитанным прямым (3) для кристаллов MgO и CaO (1 — из [17]; 2 — из [1]). Экспериментальные точки хорошо укладываются на рассчитанные прямые (3), соответствующие фазе В1 окислов MgO и CaO.

Полученные результаты могут быть использованы при интерпретации экспериментальных данных по ударному сжатию окислов, а также для построения аддитивных уравнений состояния минералов и горных пород.

Поступила 5 VI 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Альтшулер Л. В., Шарипджанов И. И. Аддитивные уравнения состояния силикатов при высоких давлениях. — Изв. АН СССР. Физика Земли, 1971, № 3.
2. Калашников Н. Г., Павловский М. И., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф. Динамическая сжимаемость минералов группы кальцита. — Изв. АН СССР. Физика Земли, 1973, № 2.
3. Альтшулер Л. В., Шарипджанов И. И. Кристаллохимия фаз высокого давления окислов и минералов. — В кн.: Горение и взрыв (материалы IV Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву). М., Наука, 1977.
4. Альтшулер Л. В., Павловский М. И., Кулешов А. В., Симаков Г. В. Исследование галогенидов щелочных металлов при высоких давлениях и температурах ударного сжатия. — ФТТ, 1963, т. 5, с. 279.
5. Жданов В. А., Поляков В. В. Ударные адиабаты щелочно-галогидных кристаллов. — ПМТФ, 1976, № 6.
6. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., Наука, 1968.
7. Зельдович Я. В., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., Наука, 1966.
8. Cantor S. Lattice energies of cubic alkaline-earth oxides. Affinity of oxygen for two electrons. — J. Chem. Phys., 1973, vol. 59, p. 5189.
9. Базаров И. П., Котенок В. В. Теория полиморфных превращений в ионных кристаллах. — ЖФХ, 1973, т. 47, с. 2239.
10. La S. Y., Barsch G. R. Pressure derivatives of second-order elastic constants of MgO. — Phys. Rev., 1968, vol. 172, p. 857.
11. Pointon A. J., Taylor R. G. F. Elastic constants of magnesia, calcia and spinel at 16 GHz and 4,2 K. — Nature (Engl.), 1968, vol. 219, p. 712.
12. Johnston D. L., Thraster P. H., Kearney R. J. Elastic constants of SrO. — J. Appl. Phys., 1970, vol. 41, p. 427.
13. Vetter V. H., Bartels R. A. BaO single crystal elastic constants and their temperature dependence. — J. Phys. and Chem. Solids, 1973, vol. 39, p. 1448.
14. Perez-Albuern E. A., Drickamer H. G. Effect of high-pressure on the compressibilities of seven crystals having the NaCl or CsCl structures. — J. Chem. Phys., 1965, vol. 43, p. 1381.
15. Liu Lin-Gun, Basset W. Effect of pressure on the crystal structure and the lattice parameter of BaO. — J. Geophys. Res., 1972, vol. 77, p. 4934.
16. Liu Lin-Gun, Basset W. Changes of the crystal structure and the lattice parameter of SrO at high pressure. — J. Geophys. Res., 1973, vol. 78, p. 8470.
17. Мэзон У. Применение физической акустики в квантовой физике твердого тела. — В кн.: Физическая акустика. М., Мир, 1970.