

¹ Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 15, Новосибирск, 630090, Россия

² Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

E-mail: ¹ skin@hydro.nsc.ru; ² konstantinm@hydro.nsc.ru

РАСЧЕТ УДАРНОЙ АДИАБАТЫ ПОРОШКОВЫХ СМЕСЕЙ С УЧЕТОМ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФИЦИЕНТА ГРЮНАЙЗЕНА ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

В работе предложена модель, позволяющая рассчитать ударную адиабату порошковой смеси. В модели учитывается зависимость коэффициента Грюнайзена в явном виде только от температуры. Проведено сравнение результатов расчетов с известными экспериментальными результатами разных авторов для порошков и смесей различных составов. Показано, что расчет дает хорошее согласие с экспериментом для двух- и трехкомпонентных (по числу конденсированных фаз) смесей для всех известных авторам экспериментальных данных.

Ключевые слова: ударная адиабата, пористая гетерогенная среда, порошковая смесь, коэффициент Грюнайзена.

Исследования поведения пористых смесей порошковых материалов при ударно-волновом нагружении представляют интерес для многих задач современной науки. Они важны и для решения прикладных задач динамического компактирования, ударно-волнового синтеза и других взрывных технологий. Для описания поведения порошковых смесей желательно иметь достаточно простую модель, дающую, однако, хорошее соответствие эксперименту в широком диапазоне давлений как для сплошных, так и для пористых материалов.

Имеется большое число подходов к выбору уравнения состояния (УС) твердого тела при динамических нагрузках (см., например, [1–4]). Одним из широко распространенных является подход Ми – Грюнайзена; для УС типа Ми – Грюнайзена характерны простота и совершенство, при этом выбор параметра (коэффициента) Грюнайзена может быть произведен несколькими путями [5].

В данной работе представлены результаты по дальнейшему развитию апробированной в [6] модели расчета ударно-волнового нагружения пористых сред и смесей порошков с учетом наличия воздуха в порах. Модель основана на предположении, что все компоненты смеси, включая газ в порах, при

ударно-волновом нагружении находятся в термодинамическом равновесии. Для описания поведения конденсированных фаз используются УС типа Ми – Грюнайзена. При достаточно невысоких сжатиях коэффициент Грюнайзена Γ и теплоемкость c_v можно считать постоянными и равными их величине при нормальных условиях [2].

Запишем систему уравнений, определяющих состояние конденсированных фаз пористой смеси, полагая, что

$$P(\rho, T) = P_x + P_T \text{ и } E(\rho, T) = E_x + E_T.$$

Холодная составляющая давления описывается уравнением типа уравнения Тэта. Тогда УС для каждой i -й компоненты с текущей и начальной плотностью ρ_i , ρ_{i0} имеет вид

$$P = A_i \cdot \left((\rho_i / \rho_{i0})^{n_i} - 1 \right) + \Gamma_i \cdot c_{vi} \cdot (T - T_0) \cdot \rho_i,$$

где $i = 1, 2, \dots$. Простота и удобство использования этого уравнения обусловили его широкую популярность [7], поскольку для каждого вещества помимо Γ либо взаимосвязанной с ним величины предельного сжатия $h = 1 + 2/\Gamma$, оно содержит только две подгоночных константы A и n [4]. Для газа берем уравнение состояния идеального газа. В рамках данной модели в предположении, что ударная адиабата (УА) смеси существует, выписываются условия динамической совместности на фронте волны: условия со-

* Работа выполнена при частичной поддержке Интеграционного проекта СО РАН № 32.

хранения потока массы для каждого компонента смеси и условия сохранения потоков импульса и энергии для смеси в целом. В [6] показано, что полученных уравнений в совокупности с УС каждого компонента достаточно для нахождения зависимостей типа $P(U)$ или $D(U)$ (P , U , D – давление, массовая и волновая скорости соответственно), которые можно трактовать как УА многокомпонентной смеси.

Простая схема построения УА, предложенная в [6], позволяет исследовать различные варианты зависимости функции Грюнайзена для апробации новых подходов. Как известно, величина Γ уменьшается с ростом давления, и, как правило, строится зависимость Γ от объема. Поскольку УС в приближении Грюнайзена с величиной $\Gamma(V, T)$, не зависящей от T не дает возможности точно рассчитывать ни энтропию, ни температуру, его нельзя считать полным [8]. Довольно часто для описания зависимости $\Gamma(V)$ используется модель

$$\Gamma \cdot \rho = \text{const}, \quad (1)$$

где ρ – плотность твердой фазы [5; 9]. Как показали расчеты, для меди эта зависимость позволяет описывать точки при высоких давлениях, однако другие материалы не дают такого соответствия. В [10] отмечалось, что для металлов эксперимент однозначно указывает на необходимость усовершенствования УС путем учета уменьшения коэффициента Грюнайзена с ростом температуры. При определенной пористости рост давления и, следовательно, температуры происходит при практически постоянном или увеличивающемся объеме, в этом случае зависимости только от объема не достаточно. В [11] сконструирован коэффициент Грюнайзена $\Gamma(V, T)$ как функция объема V и температуры T , что позволило построить УА до сжатия σ титана в 1,6 и свинца в 2,2 раза, где $\sigma = \frac{\rho}{\rho_0}$.

На основании качественного рассмотрения имеющихся данных здесь предлагается апробировать коэффициент Грюнайзена, который в явном виде зависит только температуры, в следующем виде:

$$\Gamma(T) = \frac{1}{\frac{1}{\Gamma(T_0) - \Gamma(T_\infty)} + cT} + \Gamma(T_\infty). \quad (2)$$

Параметры c и $\Gamma(T_\infty)$ выбираются из условия соответствия расчетных УА известным экспериментальным результатам для каждого материала. При начальной температуре $T = T_0$ берется $\Gamma(T_0)$ на основании известных данных при нормальных условиях [12; 13], промежуточное значение $\Gamma(T_*)$ при температуре $T = T_*$ позволяет описывать экспериментальные точки при средних сжатиях материала, асимптотическое значение $\Gamma(T_\infty)$ – при максимальных сжатиях. Фактически добавляются два свободных параметра. Полученные в результате численного моделирования значения параметров, выбранные для последующего расчета УА гетерогенных сред, приведены в таблице (см. ниже).

Для ряда материалов значение $\Gamma(T_\infty)$ лежит в районе 0,5, что согласуется с предельным значением коэффициента Грюнайзена, предложенным в [5; 8]. Распространенное значение $2/3$, использованное, например, в [11], позволяет описать УА только для никеля, для которого имеются данные лишь до $\sigma = 2$ (давление до 1 000 ГПа), причем расчеты УА сплошного никеля по предлагаемой здесь модели и моделям [11] и (1) дают близкие результаты. При более высоких степенях сжатия ($\sigma = 3-5$) и давлениях более 5 ТПа не удается описать имеющиеся экспериментальные результаты с указанным предельным значением $2/3$.

Из перечисленных в таблице материалов на рис. 1 для меди приведено сравнение

Вещество	A (ГПа)	ρ (кг/м ³)	n	C_v (Дж/кг·К)	$\Gamma(T_0)$	$\Gamma(T_*)$	T_* (К)	$\Gamma(T_\infty)$
Вольфрам	101,80	19235	3,1	140	1,61	1,35	23000	0,400
Медь	34,83	8930	4,0	380	2,00	1,50	23000	0,510
Титан	42,54	4527	2,5	522	1,12	0,75	23000	0,505
Никель	45,30	8875	4,2	460	1,91	1,25	23000	0,667
Свинец	11,68	11346	4,0	129	2,60	1,50	15100	0,315
Углерод (алмаз)	200	3515	2,6	500	1,10	0,55	20000	0,500

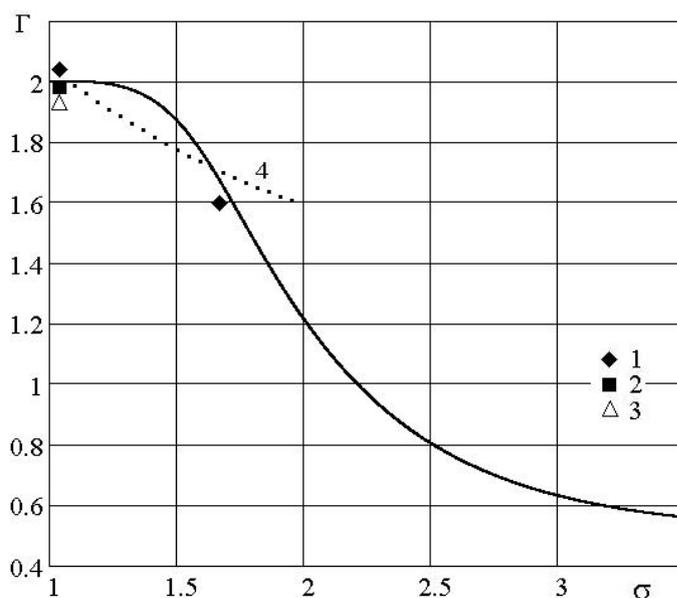


Рис. 1. Зависимость коэффициента Грюнайзена от сжатия: 1 – [12]; 2 – [2]; 3 – [13]; 4 – расчет из [10]; сплошная линия – расчет по (2) с коэффициентами из таблицы (см. выше)

рассчитанных по (2) значений Γ с пересчетом на зависимость $\Gamma(\sigma)$ с известными результатами других авторов.

На рис. 2, 3 в сравнении с известными экспериментальными результатами показаны УА, рассчитанные для сплошных титана и свинца, при различных подходах к задаче Γ : сплошная линия 1 – расчет по (2), 2 – $\Gamma = \text{const}$, 3 – $\Gamma(V, T)$ [11], 4 – расчет по модели (1).

После подбора параметров для сплошных материалов была проведена проверка описания моделью (2) ударно-волнового нагружения пористых материалов, а затем и смесей. Ниже представлены P - U диаграммы сплошных и пористых вольфрама (рис. 4) и никеля (рис. 5). Эти результаты показывают хорошее совпадение расчетов с экспериментами как для сплошных, так и для пористых материалов в широком диапазоне величины пористости (пористость μ определяется как отношение плотностей пористого и сплошного материалов).

Предложенная модель дает хорошее соответствие и для определения температуры в широком диапазоне, например, совпадая с данными в [24] оценками: при пористости 0,05 и давлении 50 ГПа температура никеля

оценивается как 80 000°; расчет по предложенной модели дает 81 500°.

Далее переходим к описанию смесей, рассматривая как пористые смеси, так и сплавы. Ниже приведены результаты для смеси Cu–W [9], называемой элконитом (Elconite). В [16; 25] элконит рассматривался как сплав, с учетом этого расчеты проводились в аддитивном приближении. Давая хорошее описание при соотношении Cu–W (55 %) и Cu–W (78 %), для Cu–W (25 %) получали систематическое отклонение расчета от экспериментальных данных, что объяснялось погрешностью эксперимента. В работе [5] элконит рассматривается как смесь, однако используемый метод расчета не учитывает пористость. Отмечается, что при небольшой пористости отличие расчета с экспериментом невелико, а для Cu–W (25 %) расчет также хуже всего согласуется с экспериментом. Учет пористости в рамках рассматриваемой здесь модели и с учетом зависимости (2) для данной смеси позволил достоверно описать имеющиеся экспериментальные данные без существенных отклонений для всех вариантов пористости элконита, в том числе и для пористости 0,936, которая соответствовала Cu–W (25 %). Для смесей с малой пористостью

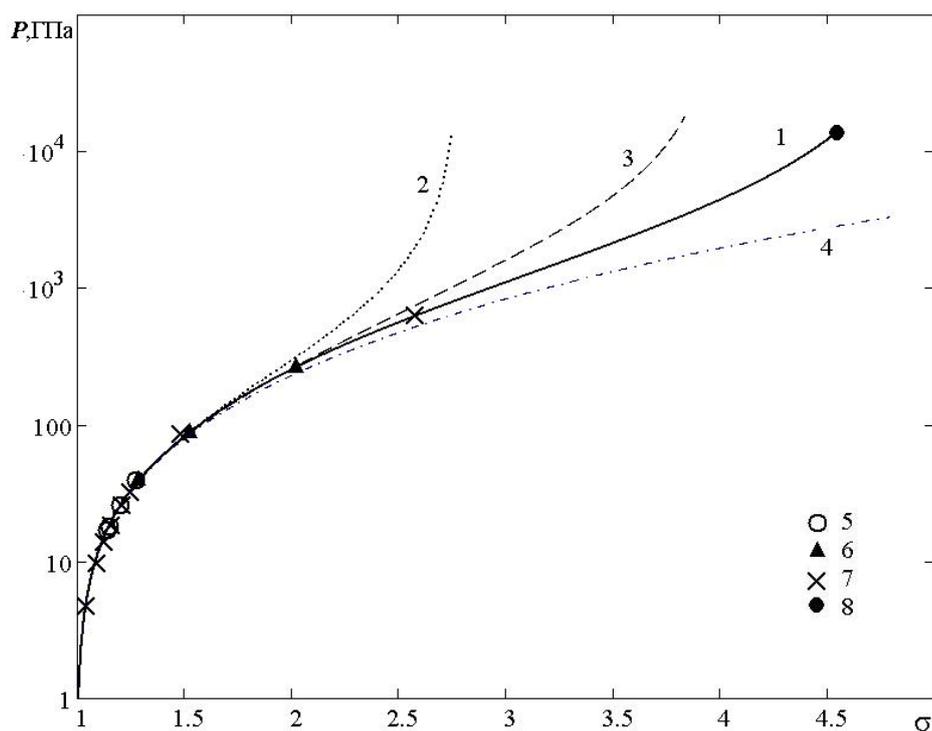


Рис. 2. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов для УА сплошного титана в координатах давление – сжатие; 1–4 – расчет, 5–8 – эксперимент (5 – [14], 6 – [15], 7, 8 – [16])

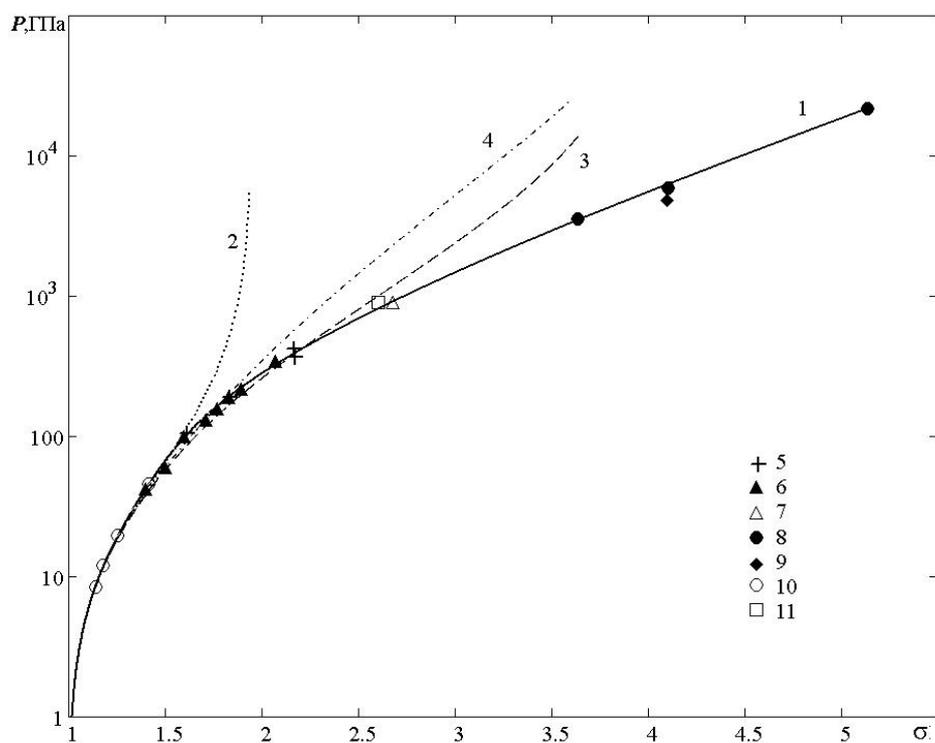


Рис. 3. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов для УА сплошного свинца в координатах давление – сжатие; 1–4 – расчет; 5–11 – эксперимент (5, 6, 8, 11 – [16], 7 – [17], 9 – [18], 10 – [19])

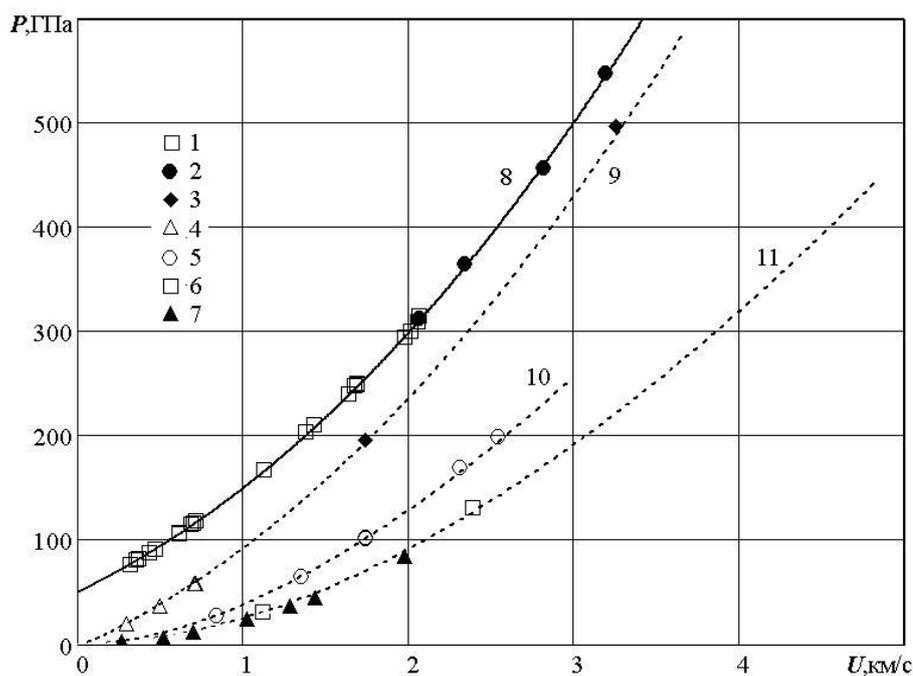


Рис. 4. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов для УА сплошного и пористого вольфрама в координатах давление – массовая скорость: 1–7 – эксперимент; 8–11 – расчет. Сплошной вольфрам, $\mu_{10} = 1$ (1 – [20], 2 – [21]); пористый вольфрам, $\mu_{10} = 0,97$ (3 – [22], 4 – [16]), $\mu_{10} = 0,69$ (5 – [16]), $\mu_{10} = 0,57$ (6, 7 – [16])

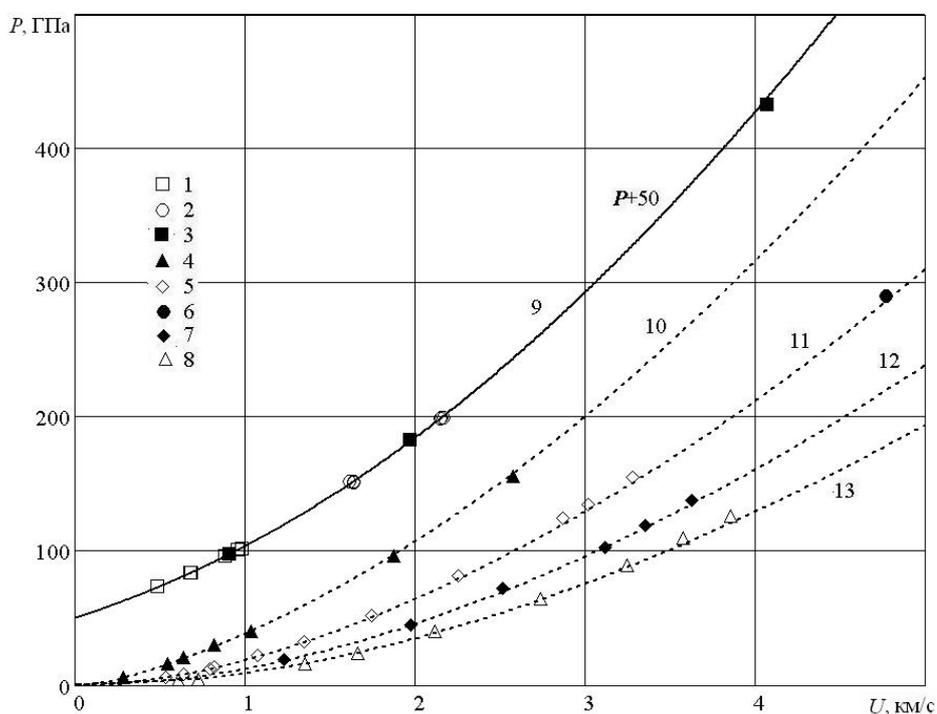


Рис. 5. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов для УА сплошного и пористого никеля в координатах давление – массовая скорость: 1–8 – эксперимент; 9–13 – расчет. Сплошной никель, $\mu_{10} = 1$ (1 – [14], 2 – [23], 3 – [16]); пористый никель, $\mu_{10} = 0,90$ (4 – [16]), $\mu_{10} = 0,71$ (5 – [16], 6 – [9]), $\mu_{10} = 0,58$ (7 – [16]), $\mu_{10} = 0,50$ (8 – [16])

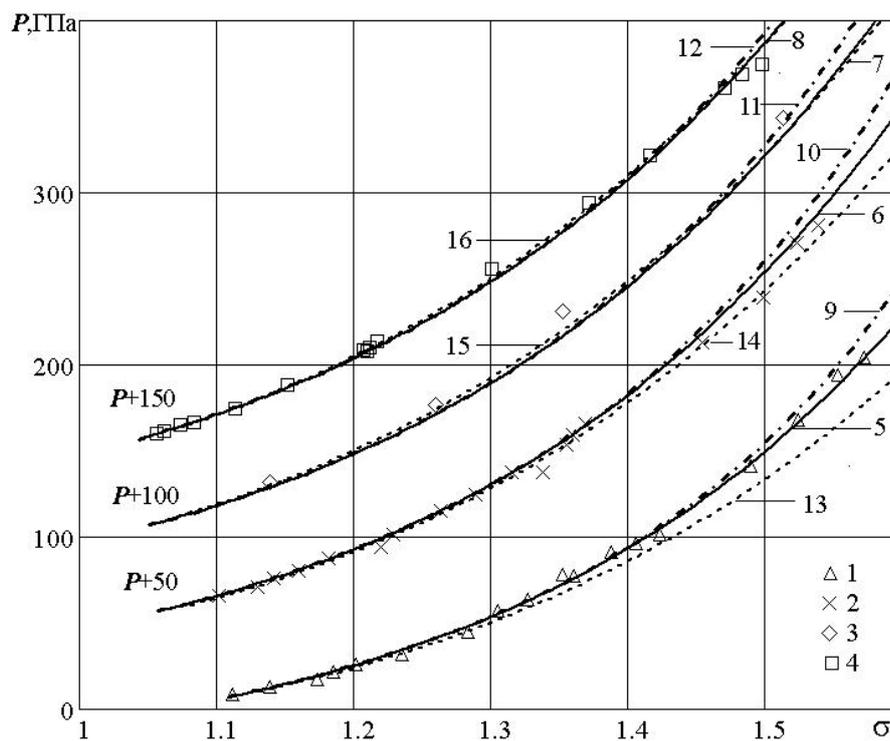


Рис. 6. Расчет и эксперимент для УА пористой смеси вольфрама и меди в координатах давление – сжатие смеси: 1–4 – [9]; 5–8 – расчет по (2); 9–12 – расчет с $\Gamma = \text{const}$; 13–16 – аддитивное приближение (1 – $\mu = 0,936$; 2 – $\mu = 0,978$; 3 – $\mu = 0,981$; 4 – $\mu = 0,986$)

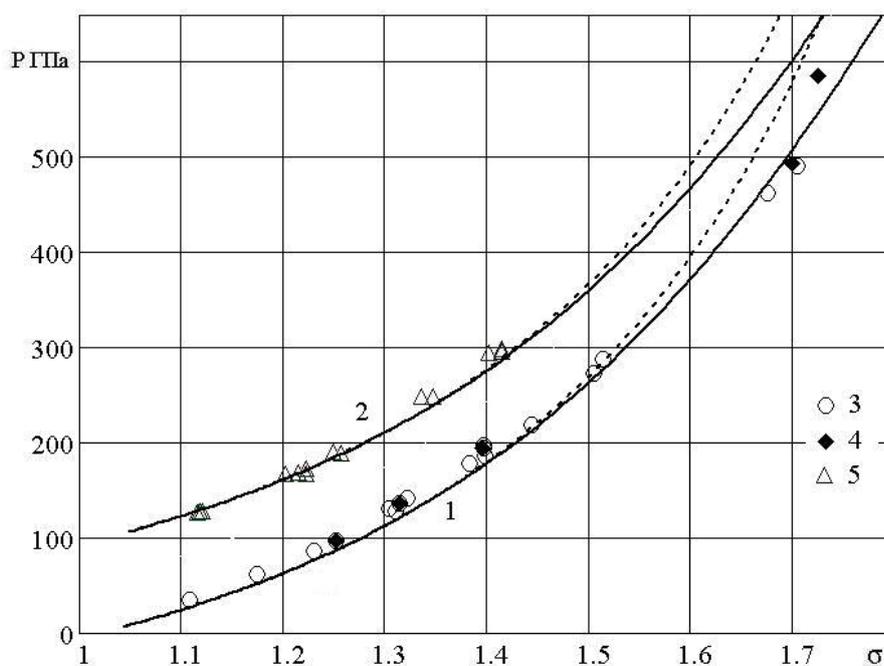


Рис. 7. Расчет для УА смеси вольфрама, меди и никеля в координатах давление – сжатие. Сплошная линия – расчет по (2); пунктир – $\Gamma = \text{const}$: 1 – wt% W(90)Ni(6)Cu(4) $\mu = 0,98$ (3 – [15], 4 – [19]); 2 – wt% W(90)Ni(7.5)Cu(2.5) $\mu = 0,975$ (5 – [19])

показано хорошее соответствие как экспериментальным данным, так и расчетам в аддитивном приближении. Эти результаты представлены на рис. 6 в координатах давление – сжатие σ (сплошная линия).

На этом же графике (см. рис. 6) для сравнения приведен расчет УА смеси в аддитивном приближении [16] (штриховая линия). Из результатов видно, что даже при умеренных значениях пористости (0,936) аддитивное приближение уже перестает соответствовать экспериментальным результатам, как и расчет при постоянном значении Γ (штрихпунктирная линия).

Полученные результаты показывают возможность описания в более широком диапазоне сжатий как монолитных, так и пористых материалов, используя предложенную зависимость функции Грюнайзена только от температуры. Дополняя соответствующие уравнения, несложно построить УА и для большего количества компонентов смеси. Проведены расчеты для тройных сплавов и смесей. Один из результатов таких расчетов приведен на рис. 7 для смеси вольфрама, никеля и меди: процентный состав W(90)Ni(6)Cu(4) $\mu = 0,98$ и процентный состав W(90)Ni(7,5)Cu(2,5) $\mu = 0,975$ [15; 19]. Расчет отображен сплошной линией, для сравнения пунктиром приведен расчет при $\Gamma = \text{const}$. Показано, что учет уменьшения Γ с ростом T позволяет расширить область достоверного описания, в том числе и для тройных смесей.

Таким образом, в данной работе предложена достаточно простая модель расчета УА пористых материалов, позволяющая производить достоверные расчеты и для пористых смесей. Показано, что модель адекватно описывает известные экспериментальные результаты для достаточно многих сплошных и пористых материалов, для которых имеются экспериментальные данные, а также может быть использована для подбора соотношений компонентов смеси с целью получения заданных параметров сплошных и пористых материалов после воздействия ударными волнами.

Список литературы

1. Жарков В. К., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких

давлениях и температурах. М.: Наука, 1968. 311 с.

2. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 688 с.

3. Бушман А. Ф., Фортон В. Е. Модели уравнения состояния вещества // УФН. 1983. Т. 140, вып. 2. С. 177–232.

4. Копышев В. К., Медведев А. Б. Обзор принципиальных идей моделей уравнения состояния во ВНИИЭФ // Высокие плотности энергии. Саров, 1997. С. 572.

5. Люкшин Б. А., Герасимов А. В., Крестулева Р. А., Люкшин П. А. Моделирование физико-механических процессов в неоднородных конструкциях. Новосибирск. Изд-во СО РАН, 2001. 272 с.

6. Кинеловский С. А., Маевский К. К., Родиков А. С. Одна модель расчета ударной адиабаты пористой гетерогенной среды // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2008. Т. 3, вып. 1. С. 3–11.

7. Голубев В. К. Определение диапазона применимости для уравнения состояния металлов с постоянным коэффициентом Грюнайзена // Хим. физика. 2002. Т. 21, № 10. С. 30–35.

8. Физика высоких плотностей энергии / Под ред. П. Кальдиrolа, Г. Кнопфель. М.: Мир, 1974.

9. McQueen R. G., Marsh S. P., Taylor J. W., Fritz J. N., Carter W. J. The Equation of State of Solids from Shock Wave Studies // High Velocity Impact Phenomena / Ed. by R. Kinslow. N. Y.: Academic Press, 1970. P. 293–417.

10. Кормер С. Б., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Колесникова А. Н. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах // ЖЭТФ. 1962. Т. 42, вып. 3. С. 686–702.

11. Молодец А. М., Молодец М. А. Температурная зависимость функции Грюнайзена химических элементов // Хим. физика. 1997. Т. 16, № 5. С. 122–126.

12. Бабичев А. П., Бабушкина Н. А., Братковский А. М. и др. Физические величины. М.: Энергоатомиздат, 1991. 484 с.

13. Новикова С. И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974. 224 с.

14. Walsh J. M., Rice M. H., McQueen R. G., Yarger F. L. Shock-Wave Compressions of

Twenty-Seven Metals Equations of State of Metals // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 108. P. 196–216.

15. *Isbell W. H., Shipman F. H., Jones A. H.* Hugoniot Equation of State Measurements for Eleven Materials to Five Megabars. General Motors Corp., Mat. Sci. Lab. Report MSL-68-13, 1968.

16. *Трунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклотов М. В., Симаков Г. В.* Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров, 2001. 446 с.

17. *Mitchell A. C., Nellis W. J., Moriarty J. A., Heinle R. A., Holmes N. C., Tipton R. E., Repp G. W.* Equation of State of Al, Cu, Mo, and Pb at Shock Pressures up to 2.4 TPa (24 Mbar) // *J. Appl. Phys.* 1991. Vol. 69. P. 2981–2986.

18. *Ragan C. E.* Shock Compression Measurements at 1 to 7 TPa // *Phys. Rev. Ser. A.* 1982. Vol. 25. P. 3360–3375.

19. *Compendium of shock wave data* / Ed. by M. van Thiel. Livermore: Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-50108, 1977.

20. *McQueen R. G., Marsh S. P., Taylor J. W., Fritz J. N., Carter W. J.* The Equation of State of Solids from Shock Wave Studies // *High Velocity Impact Phenomena* / Ed. by R. Kinslow. N. Y.: Academic Press, 1970. Append. P. 515–568.

21. *Hixson R. S., Fritz J. N.* Shock Compression of Tungsten and Molybdenum // *J. Appl. Phys.* 1992. Vol. 71 (4). P. 1721–1728.

22. *LASL Shock Hugoniot Data* / Ed. by S. P. Marsh. Berkeley: Univ. California Press, 1980.

23. *McQueen R. G., Marsh S. P.* Equation of State for Nineteen Metallic Elements // *J. Appl. Phys.* 1960. Vol. 31. P. 1253–1269.

24. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества* / Под ред. В. Е. Фортва. М.: Наука, 2000. 425 с.

25. *Трунин Р. Ф.* Исследования экстремальных состояний конденсированных веществ методом ударных волн. Уравнения Гюгонио. Саров, 2006. 286 с.

Материал поступил в редколлегию 27.05.2009

S. A. Kinelovskij, K. K. Maevskij

**CALCULATION OF THE SHOCK ADIABAT OF POWDER MIXTURES
WITH A GLANCE A DEPENDENCE OF THE GRÜNEISEN COEFFICIENT ON TEMPERATURE**

In work the model, allowing to calculate a shock adiabat of a powder mixture is offered. In model dependence of Grüneisen coefficient in an explicit form only from temperature is considered. Comparison of effects of calculations with known experimental effects of different authors for powders and intermixtures of various compositions is made. It is shown that calculation yields the good consent with experiment for two- and ternary (on number of condensed phases) intermixtures for all experimental data known to authors.

Keywords: a shock adiabat, porous heterogeneous medium, a powder mixture, Grüneisen coefficient.