

06

Оценка термодинамических параметров ударно-волнового воздействия на высокопористые гетерогенные материалы

© С.А. Кинеловский, К.К. Маевский

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия
e-mail: konstantinm@hydro.nsc.ru

(Поступило в Редакцию 9 декабря 2015 г.)

Определение свойств порошковых смесей большой пористости при ударно-волновом нагружении проводится с помощью термодинамически равновесной модели. Расчеты по этой модели хорошо соответствуют данным, полученным на основании экспериментов в широком диапазоне давлений. Для конденсированных фаз используется уравнение состояния типа уравнения Ми–Грюнайзена в предположении зависимости коэффициента Грюнайзена от температуры. Описаны термодинамические параметры смесей для двух и более конденсированных компонентов в широком диапазоне значений давления и пористости вплоть до аэрогелей. При расчете поведения смеси используются только параметры компонентов. Проведено сравнение расчетов как с экспериментальными данными, так и с результатами моделирования других авторов.

Введение

Гетерогенные материалы в виде пористых смесей различных порошков представляют интерес для многих задач современной науки, в том числе для решения прикладных задач динамического компактирования, ударно-волнового синтеза и других взрывных технологий.

Для получения оценок термодинамических характеристик ударно-волнового воздействия на такие материалы весьма важным является построение ударной адиабаты гетерогенной среды. Решение этой задачи во многом связано с выбором концептуального подхода к рассмотрению гетерогенной смеси. В [1,2] (и в нескольких предыдущих работах авторов) для описания ударно-волнового нагружения многокомпонентных пористых материалов была использована модель, основанная на предположении, что все компоненты смеси находятся в термодинамическом равновесии, которое предполагает равенство скоростей, давлений и температур. Подобные предположения использовались, в частности, в [3–5] при рассмотрении ряда задач для двухфазных сред. Рассматриваемую модель ниже будем обозначать как модель ТЕС (thermodynamic equilibrium components). Одним из преимуществ этой модели является то, что для построения ударной адиабаты смеси используются только уравнения состояния компонентов смеси без дополнительного введения каких-либо относящихся конкретно к смеси подгоночных параметров.

В [1,2] и более ранних работах было показано, что ТЕС-модель адекватно описывает все известные экспериментальные результаты для смесей, для которых проводилось сравнение расчетов с экспериментами, включая случаи, когда плотности компонентов смеси отличаются на порядок. Изначально рассматриваемая модель разрабатывалась для описания ударно-волнового нагружения смесей с достаточно небольшой величиной пористости. Пробная оценка возможности применения

ТЕС-модели к расчету характеристик ударных волн в высокопористых смесях была сделана в [6]. Целью настоящей работы являлось более подробное рассмотрение результатов применения данной модели к расчету термодинамических характеристик ударно-волнового воздействия на высокопористые смеси, включая аэрогели, т.е. в диапазоне пористости, где она и не предполагалась работоспособной.

Моделирование термодинамических параметров ударно-волнового нагружения материалов

Для описания поведения конденсированных фаз используются уравнения состояния типа Ми–Грюнайзена. С учетом области применения данной модели для значений давления более 5 GPa начальной энергией вещества при нормальных условиях пренебрегаем. Холодная составляющая давления описывается уравнением типа уравнения Тэта, тогда термические и калорические формы уравнения состояния для каждого конденсированного компонента смеси записываются в широко известном виде

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

где ρ, ρ_0 — текущая и начальная плотности, c_v — теплоемкость (полагается постоянной), T_0 — начальная температура, A, n, Γ — коэффициенты в уравнениях состояния. Газ в порах рассматривается как один из компонентов и описывается уравнением состояния идеального газа. Далее, с учетом объемной доли компонентов в смеси выписываются условия динамической

совместности на фронте волны: условия сохранения потока массы для каждого компонента смеси и условия сохранения потоков импульса и энергии для смеси в целом [2]. Полученных уравнений в совокупности с уравнением состояния каждого компонента достаточно для нахождения зависимостей типа $P(U)$ или $D(U)$ (P, U, D — давление, массовая и волновая скорости), которые можно трактовать как ударную адиабату многокомпонентной смеси. При расчетах ударно-волнового нагружения чистого вещества последнее рассматривается как смесь с одним конденсированным компонентом, для сплошного материала полагаем объемную долю газа, равной нулю.

Расчеты по данной модели показали, что при $\Gamma = \Gamma_0 = \text{const}$, где Γ_0 — значение коэффициента Грюнайзена в нормальных условиях, расчет приемлемо описывает экспериментальные результаты для пористых смесей, вплоть до давлений на фронте ударной волны 100–200 ГПа. В связи с существенным ростом температуры пористых материалов по сравнению со сплошным материалом при динамическом воздействии и с целью расширения диапазона описываемых давлений было выбрано приближение [7], в котором предполагается, что коэффициент Грюнайзена зависит в явном виде только от температуры:

$$\Gamma(T) = 1 / \left(1 / (\Gamma(T_0) - \Gamma(T_\infty)) + C(T - T_0) \right) + \Gamma(T_\infty),$$

$$C = \left(1 / (\Gamma(T_*) - \Gamma_\infty) - 1 / (\Gamma(T_0) - \Gamma_\infty) \right) / (T_* - T_0), \quad (2)$$

где $\Gamma(T_*)$ и T_* — некоторые константы, $\Gamma(T_0) = \Gamma_0$, $\Gamma(T_\infty) = \Gamma_\infty$. Используемые в расчетах значения этих и введенных выше постоянных для различных веществ были приведены в [8]. Применение зависимости (2) оказалось перспективным для сплошных и пористых материалов, вплоть до аэрогелей, расчеты по которым проводились ранее по химической модели [9], а также для порошковых смесей на их основе для определения характеристик ударного сжатия материалов. Проведенные расчеты [1,2,8,10,11] показали, что параметры, определенные для сплошного материала, позволяют описывать экспериментальные данные в пределах их погрешности в широком диапазоне значений пористостей и давлений без дополнительных уточнений модели.

Расчет и параметры пористых материалов при динамических нагрузках

Для описания ударно-волнового нагружения меди, алюминия, никеля, кобальта, вольфрама и висмута далее используются значения параметров модели из табл. 1 (для отмеченных звездочкой строк таблицы значения параметров взяты или определены по справочным данным). Кроме того, в расчетах принято $T_0 = 300$ К и $T_* = 23$ кК.

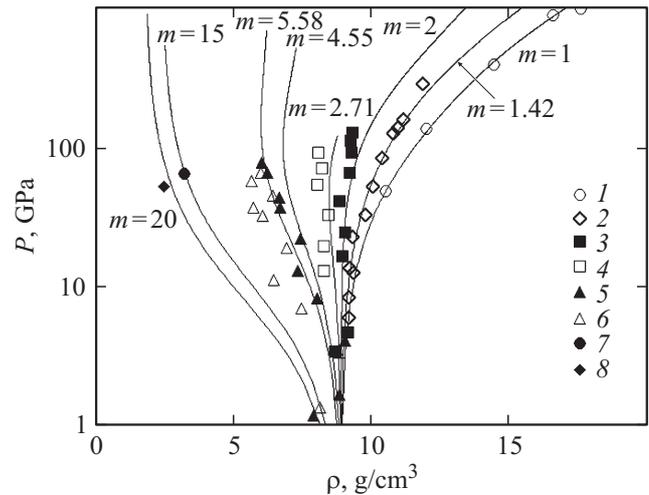


Рис. 1. Ударные адиабаты пористого никеля. Расчет по модели ТЕС — сплошные линии с соответствующими пористостями. Экспериментальные данные: 1 — $m = 1$, 2 — 1.42, 3 — 2, 4 — 2.71, 5 — 4.55, 6 — 5.58, 7 — 15, 8 — 20 [12,13].

Для пористого никеля на рис. 1 показано хорошее совпадение расчетов данным экспериментов до $m = 5$ (пористость m определяется как отношение плотности монокристалла к плотности исследуемого образца). Даже при $m = 15$ и $m = 20$ для значений давления выше 50 ГПа расчет не противоречит экспериментальным данным.

Адекватность описания ударно-волнового нагружения кобальта показана на рис. 2 в диапазоне имеющихся в распоряжении авторов данных из [14], которые там были получены на основании экспериментов для значений m от 1.6 до 3.4. Для области значений давления выше 5 ГПа, соответствующей диапазону применимости модели ТЕС, расчет соответствует данным, полученным на основании эксперимента [14].

На рис. 3 и 4 приведены расчеты ударной адиабаты пористых алюминия и меди, полученные по двум моделям: химической [9] и модели ТЕС [8]. Сравнение проводится наложением расчетов по модели ТЕС на графики, приведенные в [9]. Данные, полученные на основании экспериментов, брались из [12] и электронной базы [13].

Таблица 1. Параметры модели

№	Параметр	Металлы				
		Al	Cu	Ni	W	Co
1*	$\rho, \text{g/cm}^3$	2.712	8.930	8.875	19.235	8.82
2*	A, GPa	24.57	34.83	45.30	101.8	37
3	n	3.10	4.00	4.20	3.105	4.5
4*	$c_V, \text{J/(kg}\cdot\text{K)}$	1000	380	460	140	627
5*	$\Gamma(T_0)$	2.13	2.00	1.91	1.61	1.99
6	$\Gamma(T_*)$	1.25	1.50	1.25	1.35	1.35
7	$\Gamma(T_\infty)$	0.300	0.510	0.667	0.40	0.50

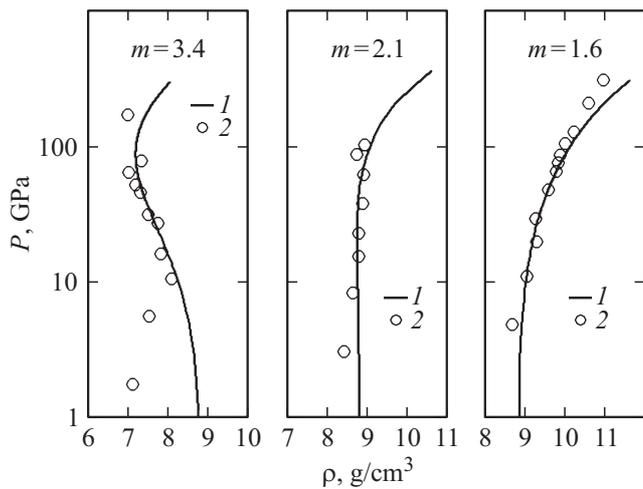


Рис. 2. Ударные адиабаты пористого кобальта. Расчет по модели ТЕС — сплошные линии 1 с соответствующими пористостями. Экспериментальные данные: 2 — $m = 1.6, 2.1, 3.4$ [14].

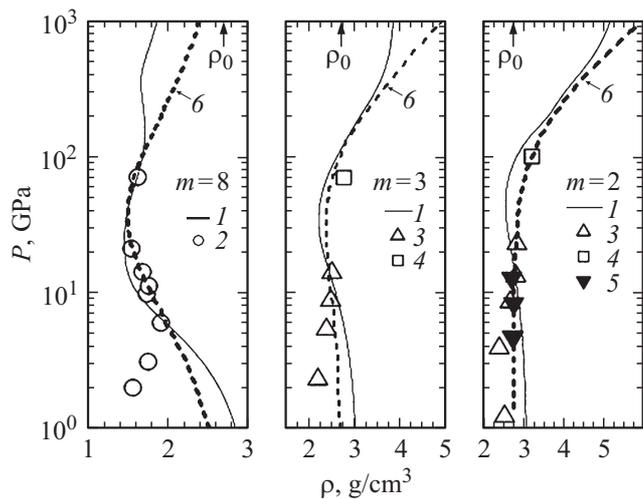


Рис. 3. Ударные адиабаты пористого алюминия. Расчеты: 1 — химическая модель (код SAHA-IV) [9], 6 — модель ТЕС. Экспериментальные данные: 2–5 [12, 13].

Как видно из приведенного сравнения для пористого алюминия на рис. 3, рассматриваемые модели хорошо описывают экспериментальные данные при давлениях выше 5 GPa. Отклонение расчетных данных для меди на рис. 4 при пористости $m = 3$ и давлении выше 1 ТПа указывает на верхнюю границу по значению давления области достоверного описания для рассматриваемой модели ТЕС. При более низких значениях давления данные расчета соответствуют данным, полученным на основании эксперимента в пределах точности последних. В областях ниже 5 GPa обе сравниваемые модели не описывают экспериментальные данные.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных для алюминия и меди, как отмечается в [9], показывает,

что экстраполяционные возможности химической модели при одних и тех же давлениях постепенно ухудшаются по мере продвижения в область адиабат меньшей пористости и соответственно более высоких плотностей. Для модели ТЕС, рассматриваемой здесь, характерна обратная ситуация. Данная модель разрабатывалась для относительно невысоких значений пористости смесей. Исходя из этого параметры материалов определялись по экспериментам для сплошных материалов, что обеспечило удовлетворительное описание в заданном первоначально диапазоне значений пористостей (в пределах 1–2). Дополнительный учет влияния температуры $\Gamma = \Gamma(T)$ позволил существенно расширить диапазон достоверного описания по значениям пористости и давлению в пределах погрешности эксперимента.

Для сравнения расчетных значений термодинамических характеристик (давления и температуры) никеля и меди различной пористости при ударно-волновом нагружении в табл. 2 приведены оценки значения температуры, полученные по трем моделям. Как видно из приведенных данных, значения температуры для пористого никеля, определенные по химической модели [9], меньше, чем рассчитанные по модели ТЕС. Здесь же даны оценки значения температуры, полученные А.Б. Медведевым с использованием полуэмпирической широкодиапазонной модели [15] для пористого никеля и меди как сплошной, так и пористой, которые приведены в [16,17]. Сравнение показывает, что при больших значениях пористости оценки температуры по модели ТЕС и [15] достаточно близки: отличие 2% для никеля и 10% для меди при значениях давлений до 100 GPa. В то же время отличие оценок значения температуры пористого никеля по сравнению с моделью [9] может достигать 30%. Для монолитной меди оценки температуры по модели ТЕС и модели [15] отличаются на 1% при существенно более высоком значении давления.

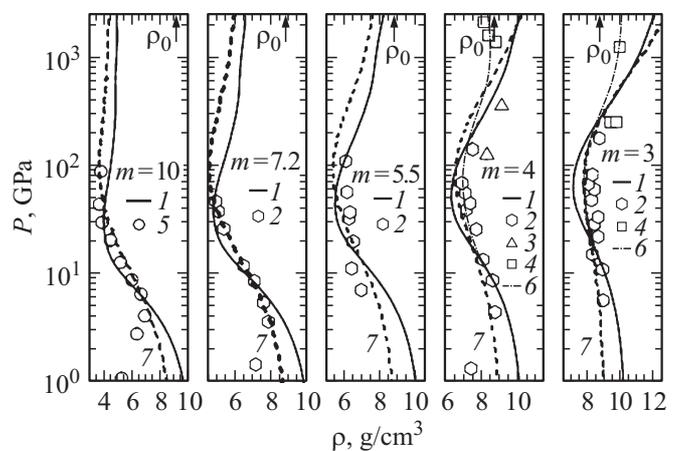


Рис. 4. Ударные адиабаты пористой меди. Расчеты: 1 — химическая модель (код SAHA-IV), 6 — модель с измененными атомными и ионными радиусами [9]; штриховая линия 7 — модель ТЕС. Экспериментальные данные: 2–5 [13].

Таблица 2. Рассчитанные термодинамические характеристики пористых никеля и меди при ударно-волновом сжатии

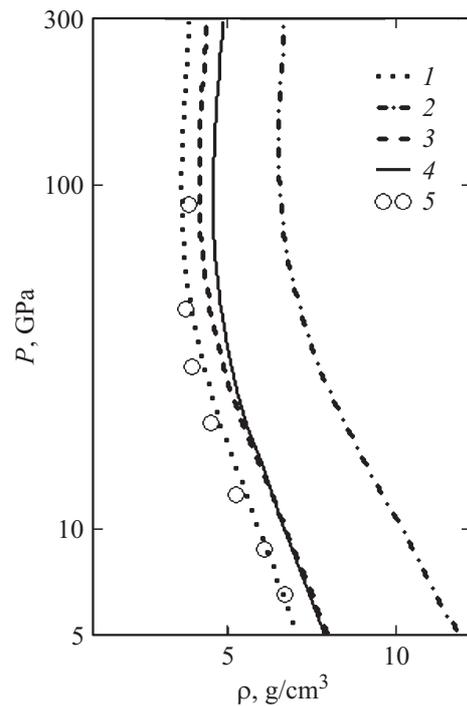
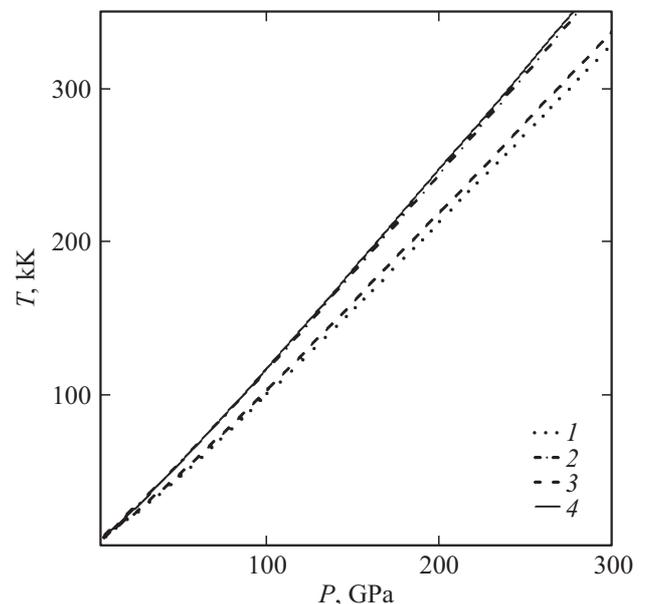
Материал	Модель	P , GPa	T , kK
Ni $m = 15$, $\rho_{00} = 0.592 \text{ g/cm}^3$	[15]	35	50
	TEC	35	45.34
	[9]	63.7	53.3
	TEC	63.7	79.41
Ni $m = 20$, $\rho_{00} = 0.444 \text{ g/cm}^3$	[15]	35	60
	TEC	35	58.91
	[15]	50	80
	TEC	50	81.5
	[9]	51.6	54
TEC	51.6	84.41	
Cu $m = 1$, $\rho_{00} = 8.93 \text{ g/cm}^3$	[15]	1200	70
	TEC	1200	70.5
Cu $m = 10$, $\rho_{00} = 0.893 \text{ g/cm}^3$	[15]	80	70
	TEC	80	77.5

Сравнения ударных адиабат на рис. 3 и 4 показывают, что различные модели могут давать близкое описание динамических параметров для данных, полученных на основании экспериментов. Однако оценки температур при высоких значениях давлений, как это следует из табл. 2, могут при этом отличаться. Данный результат подтверждает, как ранее отмечалось в [9], что „имеющиеся экспериментальные данные по ударному сжатию рассмотренных веществ нуждаются в дополнении температурной (энтропийной) информацией о достигнутых в ударном эксперименте состояниях для соответствующего выбора среди многочисленных теоретических подходов“.

Расчеты высокопористых смесей

Возможность достаточно простой модели TEC достоверно описывать поведения пористых материалов в широком диапазоне пористостей делает ее перспективной для описания ударно-волнового нагружения многокомпонентных пористых смесей в широком диапазоне параметров как по давлению, так и по пористостям. Учитывая непротиворечивость модельных расчетов значений температуры как данным, полученным на основании экспериментов, так и прямым измерениям, а также оценкам по другим моделям, можно предположить, что модель TEC позволяет разумно оценивать в том числе и значения температуры для смесей.

На рис. 5 показаны расчетные результаты, полученные для смесей следующих составов при $m = 10$: медь и вольфрам с объемными долями 50/50, плотность $\rho = 1.409 \text{ g/cm}^3$; медь с вольфрамом (90/10) — $\rho = 0.997 \text{ g/cm}^3$; медь с вольфрамом и алюминием (50/25/25) — $\rho = 0.996 \text{ g/cm}^3$. Дополнительно к расчетам по вышеуказанным смесям на рис. 5 приведены

**Рис. 5.** Ударные адиабаты с $m = 10$. Расчеты: 1 — Cu, 2 — (Cu–W 50/50), 3 — Cu–W (90/10), 4 — Cu–W–Al (50/25/25). Экспериментальные данные: 5 — [18].**Рис. 6.** Оценки температуры для материалов с $m = 10$. Расчеты: 1 — Cu, 2 — Cu–W (50/50), 3 — Cu–W (90/10), 4 — Cu–W–Al (50/25/25).

расчеты параметров ударно-волнового сжатия меди и данные, полученные на основании экспериментов, для меди $m = 10$ и $\rho = 0.894 \text{ g/cm}^3$. На рис. 6 показаны расчетные значения температуры при ударно-волновом нагружении для этих же материалов.

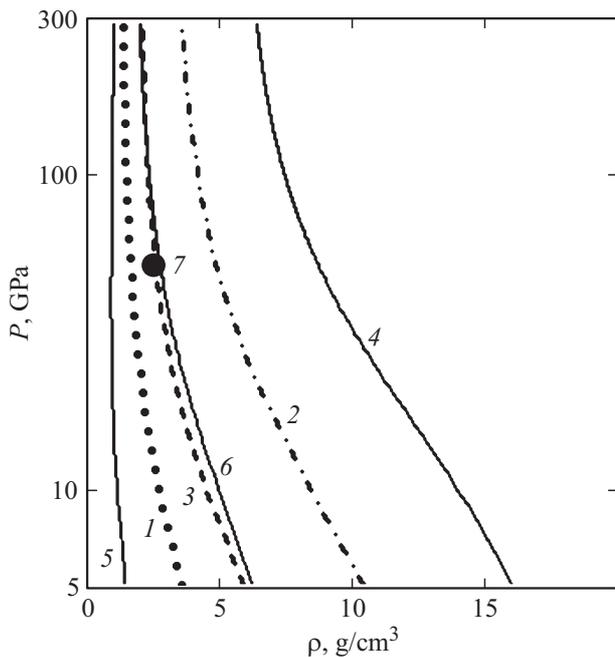


Рис. 7. Ударные адиабаты с $m = 20$. Расчеты: 1 — Ni–Al (50/50), 2 — Ni–W (50/50), 3 — Ni–Cu (50/50), 4 — W, 5 — Al, 6 — Ni. Экспериментальные данные: 7 — [18].

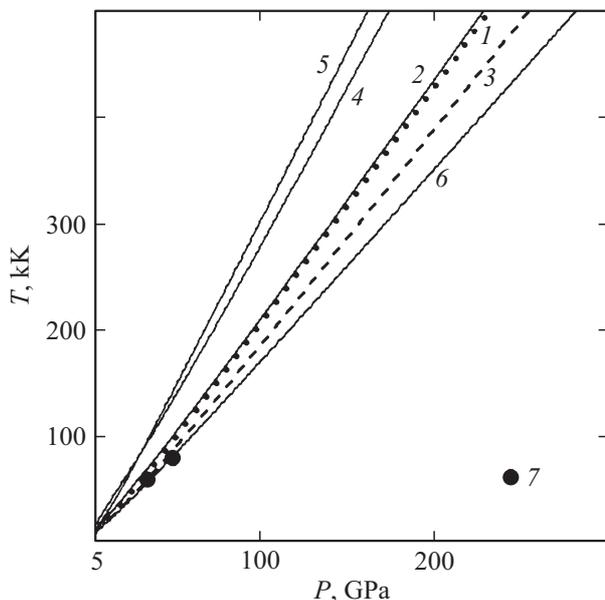


Рис. 8. Изменение температуры для материалов с $m = 20$. Расчеты: 1 — Ni–Al (50/50), 2 — Ni–W (50/50), 3 — Ni–Cu (50/50), 4 — W, 5 — Al, 6 — Ni, 7 — оценка значения температуры по модели [15].

Аналогичные расчеты параметров динамического сжатия, полученные для смесей на основе никеля при $m = 20$ с объемными долями 50/50: никель и алюминий при плотности $\rho = 0.291 \text{ g/cm}^3$, никель и вольфрам $\rho = 0.704 \text{ g/cm}^3$, никель и медь — $\rho = 0.446 \text{ g/cm}^3$, показаны на рис. 7. Дополнительно на рис. 7 нанесены

расчеты динамических параметров при ударно-волновом нагружении чистых материалов: никеля, алюминия и вольфрама при том же значении пористости $m = 20$, а также расчетная точка, полученная на основании эксперимента для пористого никеля $m = 20$ [18]. На рис. 8 показаны расчетные значения температуры для тех же материалов и смесей, что и на рис. 7, в том числе отмечены оценки температуры по модели [15] для никеля с $m = 20$.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о возможности управлять характеристиками ударно-волнового нагружения, меняя степень сжатия компонентов или температуру. Например, смесь меди и вольфрама — (90/10) и смесь меди, вольфрама и алюминия — (50/25/25) близки по плотности, однако расчетные значения температуры для этих смесей, как показано на рис. 6, заметно отличаются. Это означает, что появляется возможность определять составы смесей, которые позволяют при одном и том же значении давления существенно поднять температуру получаемого аэрогеля, практически не меняя в нем общую массу металла.

Заключение

Достаточно простая модель ударно-волнового нагружения пористых материалов позволяет проводить достоверные расчеты для смесей с большими значениями пористости. Сравнение расчетов с данными, полученными на основании эксперимента, и расчетами других авторов показывает, что рассматриваемая в настоящей работе модель динамического нагружения пористых материалов адекватно описывает известные экспериментальные результаты для различных материалов с высокой пористостью в диапазоне значений давления от 5 до 1000 GPa. При этом модель позволяет оценивать термодинамические параметры каждого компонента смеси при ударно-волновом нагружении. Данная модель ТЕС существенно расширяет диапазон материалов и смесей, для которых можно достоверно проводить оценки термодинамических характеристик на фронте ударной волны, а также позволяет определять состав смеси для получения необходимых значений термодинамических параметров (давление, температура) при ударно-волновом нагружении.

Список литературы

- [1] Кинеловский С.А., Маевский К.К. // ПМТФ. 2013. Т. 54. Вып. 4. С. 13–21.
- [2] Кинеловский С.А., Маевский К.К. // ТВТ. 2014. Т. 52. Вып. 6. С. 843–851.
- [3] Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1, 2. М.: Наука, 1987.
- [4] Николаевский В.Н. // ПМТФ. 1969. Вып. 3. С. 82–88.
- [5] Мильяевский В.В., Фортон В.Е., Фролова А.А., Хищенко К.В., Чарахчян А.А., Шуришалов Л.В. // Журн. выч. мат. и мат. физики. 2006. Т. 46. Вып. 5. С. 913–931.

- [6] *Маевский К.К., Кинеловский С.А.* // Матер. науч.-коорд. сессии „Исследования неидеальной плазмы“. М., 6–7 декабря 2012. М.: ОИВТ РАН (http://www.ihed.ras.ru/npp2012/private/restore_program_rus_html_abstracts.php).
- [7] *Кинеловский С.А., Маевский К.К.* // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Сер. физ. 2009. Т. 4. Вып. 4. С. 71–78.
- [8] *Кинеловский С.А., Маевский К.К.* // ФГВ. 2011. Т. 47. Вып. 6. С. 101–109.
- [9] *Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортвов В.Е.* Термодинамика ударно-сжатой плазмы в квазихимическом представлении / Энциклопедия низкотемпературной плазмы (под ред. В.Е. Фортвова). Том приложений III-1 / Ред. А.Н. Старостин, И.Л. Иосилевский. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 530 с.
- [10] *Maevskii K.K., Kinelovskii S.A.* // AIP Conf. Proc. 2015. Vol. 1683. P. 020 132-1–020 132-4.
- [11] *Кинеловский С.А., Маевский К.К.* // Вестн. Том. гос. ун-та. Математика и механика. 2014. Вып. 3(29). С. 82–93.
- [12] *Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В.* Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006. 531 с.
- [13] *Levashov P.R., Khishchenko K.V., Lomonosov I.V., Fortov V.E.* // Shock Compression of Condensed Matter — 2003 / Eds M.D. Furnish, Y.M. Gupta, J.W. Forbes. Melville—N.Y.: AIP, 2004. P. 87. (<http://www.ihed.ras.ru/rusbank>)
- [14] *Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Сутулов Ю.Н., Медведев А.Б., Rogozkin B.D., Fedotov Y.E.* // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 3 (9). С. 1024–1038.
- [15] *Медведев А.Б.* // Вопр. атом. науки и техники. Теорет. и прикл. физика. 1992. Вып. 1. С. 12–19.
- [16] *Трунин Р.Ф., Симаков Г.В.* // ЖЭТФ. 1993. Т. 103. Вып. 6. С. 2180–2188.
- [17] *Ударные волны и экстремальные состояния вещества* / Под ред. В.Е. Фортвова, Л.В. Альтшулера, Р.Ф. Трунина, А.И. Фунтикова. М.: Наука, 2000. 425 с.
- [18] *Грязнов В.К., Жерноклетов М.В., Иосилевский И.Л., Симаков Г.В., Трунин Р.Ф., Трусов Л.И., Фортвов В.Е.* // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. Вып. 4(10). С. 1242–1265.