

УДК 532.593+536.715:546.3

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ УДАРНОГО СЖАТИЯ В МЕГАБАРНОМ ДИАПАЗОНЕ ДАВЛЕНИЯ

А. М. Молодец, Д. В. Шахрай, А. С. Савиных, А. А. Голышев, В. В. Ким

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

Приведены полуэмпирические уравнения состояния (термическое и калорическое) для расчета не только кинематических (скорость ударных волн, массовая скорость, реверберация волн), но и термодинамических (температура, давление, сжатие) параметров монолитного и пористого политетрафторэтилена при высоких давлениях ударного сжатия. Уравнения состояния предназначены для моделирования волновых взаимодействий в ударно-волновых экспериментах в рамках разработанного гидрокода. Уравнения проверены путем сравнения модельных расчетов с опубликованными результатами экспериментов и с данными собственных опытов по ударному сжатию монолитных и пористых образцов политетрафторэтилена в диапазоне $10 \div 170$ ГПа.

Ключевые слова: ударно-волновое сжатие, полимеры, коэффициент Грюнайзена, уравнение состояния.

ВВЕДЕНИЕ

Политетрафторэтилен (тефлон, фторопласт-4) широко применяется в ударно-волновых экспериментах в качестве защитной изоляционной среды между исследуемыми образцами и электрическими пьезорезистивными датчиками, например манганином [1]. При этом в непроводящих средах тефлоновое окружение используется для удаления потенциально проводящих воздушных микрополостей, примыкающих к датчику. В проводящих образцах тефлоновые пленки отделяют тоководы и чувствительный элемент датчика от окружающей токопроводящей среды — металлов, продуктов детонации и др.

Как правило, динамические жесткости тефлона и исследуемых образцов не совпадают. Поэтому для точной интерпретации показаний датчиков и последующего сопоставления модельных представлений с экспериментом необходимо учитывать волновые возмущения, вносимые тефлоновым окружением в образцы во время их ударно-волнового нагружения. Кроме этого, по мере увеличения давления ударного сжатия его электрическое сопротивление уменьшается, что приводит к паразитному

шунтированию датчика и необходимости коррекции электрических сигналов датчика.

Исследование электропроводности ударно-сжатого политетрафторэтилена марки фторопласт-4 [2–4] показало, что его электропроводность зависит как от давления, так и от температуры ударного сжатия. В этой связи, особенно при продвижении в мегабарную область давлений, возникает потребность в адекватном уравнении состояния, позволяющем достоверно рассчитывать волновые взаимодействия и температуру ударного сжатия политетрафторэтилена.

В литературе имеются полуэмпирические уравнения состояния тефлона [5], которые позволяют моделировать экспериментальные данные по изоэнтропической разгрузке и двукратному ударному сжатию тефлона при высоких плотностях энергии. Однако появились новые результаты измерения температуры ударного сжатия политетрафторэтилена [6]. Эти экспериментальные данные позволяют провести дополнительную проверку и уточнить возможности модели в прогнозировании не только кинематических, но и термодинамических параметров ударного сжатия политетрафторэтилена.

Как известно [7], тефлон претерпевает полиморфное превращение из фазы низкого давления II в фазу высокого давления III при давлениях ударного сжатия $0.5 \div 0.7$ ГПа с декрементом объема 2.2 %, примерно равным этой величине при статическом давлении. Та-

Работа выполнена при поддержке программы Президиума РАН «Вещество при высоких плотностях энергии».

© Молодец А. М., Шахрай Д. В., Савиных А. С., Голышев А. А., Ким В. В., 2013.

Таблица 1

Параметры полуэмпирических соотношений (1)–(10) (см. приложение)

T_0 , К	V_0 , см ³ /моль	Θ_0 , К	v_0 , см ³ /моль	v_x , см ³ /моль	C_1 , ГПа	C_2 , ГПа	C_3 , кДж/г
298	22.730	142.5	89.259	28.277	-703.9228	14 660.2894	-4 145.8364

ким образом, тефлон, находившийся в начальном состоянии в фазе низкого давления при ударном сжатии до давления выше 1 ГПа, оказывается в фазе III. Поэтому при высоком давлении ударного сжатия волновые взаимодействия и термодинамические параметры ударно-сжатого политетрафторэтилена определяются свойствами фазы высокого давления. В данной работе представлены полуэмпирические уравнения состояния (УРС) для описания ударного сжатия фазы высокого давления. Проверка предлагаемых уравнений состояния проведена путем сравнения расчетов с температурными экспериментами, с экспериментами на пористом политетрафторэтилене, а также с собственными экспериментами по измерению волновых взаимодействий в слоистых мишенях, изначально содержащих слой фторопласта-4.

УРС ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ УДАРНОГО СЖАТИЯ

В используемой полуэмпирической модели (см. приложение) необходимо выбрать значения ряда свойств материала при начальном давлении p_0 и начальной температуре T_0 — начального удельного объема V_0 , модуля объемного сжатия K_0 , характеристической температуры Θ_0 и коэффициента Грюнайзена γ_0 , а также выбрать опорную экспериментальную ударную адиабату. Для фазы III выбрана ударная адиабата [8], которая получена ударным сжатием фазы низкого давления плотностью $\rho_{00} = 2.152$ см³/г. Предполагалось, что для соответствующей фазы высокого давления фторопласта-4 значение V_0 , как и в [7], будет на 2.2 % меньше величины $V_{00} = 1/\rho_{00}$, т. е. удельный объем фазы III при атмосферном давлении и комнатной температуре составит $V_0 = 0.4545$ см³/г. Параметры K_0 , Θ_0 и γ_0 для фазы III в доступной литературе не обнаружены. В данной работе принято $K_0 = 2.0$ ГПа, $\Theta_0 = 142.5$ К, $\gamma_0 = 1.35$. По существу, здесь параметры K_0 , Θ_0 и γ_0 являются подгоночными и поэтому могут не совпадать с истинными значениями этих величин в фазе III при

атмосферном давлении и комнатной температуре. Параметр v_x для фазы III определялся из условия наилучшего совпадения расчетной ударной адиабаты политетрафторэтилена, находящегося изначально при нулевом давлении и температуре 300 К и имеющего пористость $m = V_{00}/V_0 = 1.022$, с экспериментальными данными [8]. Получено значение $v_x = 28.277$ см³/моль. Полный комплект констант полуэмпирического уравнения состояния политетрафторэтилена приведен в табл. 1.

ПРОВЕРКА УРС ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА ПО УДАРНЫМ АДИАБАТАМ ОДНОКРАТНОГО СЖАТИЯ

В силу полуэмпирического характера предлагаемое описание нуждается в проверке. Результаты тестирования полуэмпирических уравнений состояния политетрафторэтилена по экспериментальным ударным адиабатам представлены на рис. 1

На врезке рис. 1 показана расчетная ударная адиабата фазы III в области давлений 1 ÷ 4 ГПа в сравнении с экспериментальными данными [7, 8]. Видно, что расчетная кривая аппроксимирует экспериментальные точки в пределах их разброса. Отметим также, что полуэмпирическое УРС воспроизводит нелинейный ход ударной адиабаты политетрафторэтилена в координатах «скорость ударной волны D — массовая скорость u ».

На рис. 1 линией 1 представлена расчетная ударная адиабата монолитного политетрафторэтилена в сравнении с экспериментальными данными [9, 10]. В области высоких давлений ударного сжатия наблюдается удовлетворительная аппроксимация эксперимента [8] и согласие расчета с экспериментом [9] в области максимальных скоростей. Таким образом, в рамках предлагаемого описания не возникает необходимости аппроксимировать экспериментальные данные двумя отрезками прямых.

Рассмотрим, как соотносятся результаты расчетов с данными экспериментов по ударному сжатию пористых образцов политетрафторэтилена. Расчет ударных адиабат об-

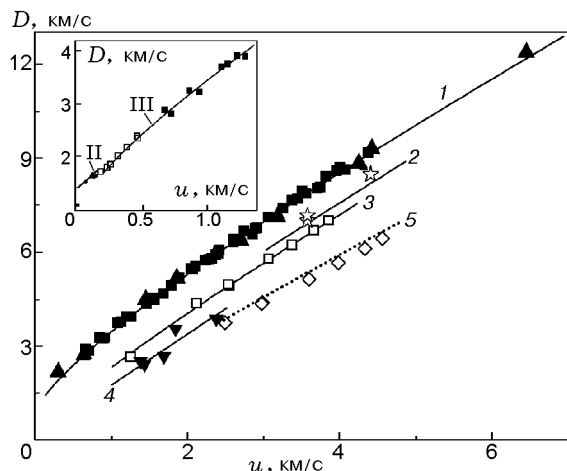


Рис. 1. Ударные адиабаты политетрафторэтилена в координатах «скорость ударной волны — массовая скорость» для образцов тефлона с различной начальной пористостью:

темные квадраты — данные [8], $m = 1.022$, треугольники — [9], $m = 1.004$, звездочки — [3], $m = 1.279$, светлые квадраты — [10], $m = 1.445$, обратные треугольники — [10], $m = 2.252$, ромбы — [10], $m = 2.814$; линии 1–5 — расчет данной работы для однократного ударного сжатия образцов политетрафторэтилена: 1 — $m = 1.022$, 2 — $m = 1.279$, 3 — $m = 1.445$, 4 — $m = 2.252$, 5 — $m = 2.814$; врезка — ударные адиабаты тефлона в области фазового перехода II–III: кружки и светлые квадраты — эксперимент [7] для фаз II и III соответственно, темные квадраты — эксперимент [8]; II — аппроксимация для фазы II из [7], III — расчет ударной адиабаты фазы III из данной работы

разцов с различной начальной пористостью («пористых» ударных адиабат) осуществлялся в пренебрежении электронными составляющими давления и энергии в приближении [11], в котором предполагается, что изоэнтропа пористого материала от V_{00} до V_0 представляет собой нулевую линию в координатах «объем — энтропия». Заметим, что расчеты ударных адиабат при давлениях выше 80 ГПа и «пористых» ударных адиабат являются прогнозными. Из рис. 1 видно, что этот прогноз совпадает с экспериментом при пористости $m = 1.279, 1.445, 2.252$ (графики 2–4). Что же касается пористости $m = 2.814$, то расчет с использованием только данных табл. 1 дает результаты, не согласующиеся с экспериментальной ударной адиабатой. Тем не менее разумную расчетную зависимость $D(u)$ можно получить и для этой пористости, если ввести еще один подгоночный параметр β_T согласно соотношению (14) (см. приложение). Его введе-

ние означает, что предполагается зависимость коэффициента Грюнайзена не только от объема, но и от температуры. При $\beta_T = 720 \cdot 10^{-6}$ К, что равно объемному коэффициенту теплового расширения фторопласта-4 при температуре 600 К [12], можно согласовать расчет пористой ударной адиабаты с экспериментом так, как это показано линией 5 на рис. 1.

Результаты расчета температуры вдоль ударных адиабат политетрафторэтилена показаны на рис. 2, где представлена также экспериментальная точка из [6]. Видно, что расчет с использованием предложенных УРС согласуется с результатами [6]. Кроме того, зависимость 1 совпадает с расчетом [13] температуры ударного сжатия политетрафторэтилена до 50 ГПа, причем теплоемкость в этих расчетах зависела от объема и температуры и вычислялась как сумма теплоемкостей для акустических и оптических ветвей колебаний. На

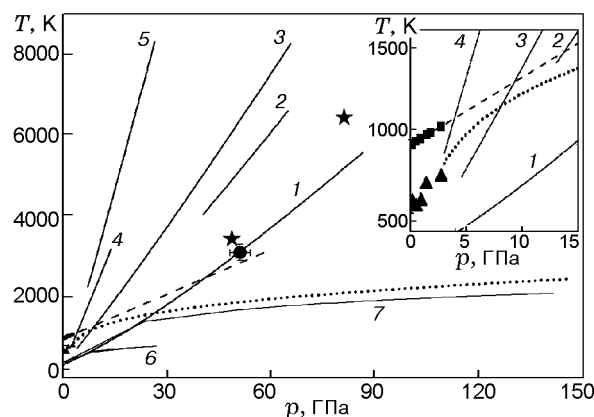


Рис. 2. Ударные адиабаты политетрафторэтилена в координатах «температура — давление»:

кружок — эксперимент [6], звездочки — расчет [3], линии 1–5 — расчет данной работы однократного ударного сжатия образцов политетрафторэтилена: 1 — $m = 1.022$, 2 — $m = 1.279$, 3 — $m = 1.445$, 4 — $m = 2.252$, 5 — $m = 2.814$; линии 6, 7 — расчет данной работы ступенчатого ударного сжатия образцов фторопласта-4 в постановке рис. 5 до давлений 27 (6) и 140 ГПа (7); штриховая прямая — экстраполяция [14] зависимости температуры разложения от давления из [13], пунктирная линия — кривая плавления (13) (см. приложение) с начальной точкой $T_{m0} = 870$ К, $p_{m0} = 3.0$ ГПа из [14], которой соответствует $V_{m0} = 22.63$ см³/моль; треугольники — эксперимент [14] по плавлению тефлона, прямоугольники — эксперимент [14] по разложению тефлона; врезка — увеличенный фрагмент области низких давлений и температур

рис. 2 представлены также результаты расчета [3] температуры в однократной волне сжатия, полученные с использованием уравнения состояния Ми — Грюнайзена в предположении постоянства теплоемкости. Видно, что результаты [3] превышают результаты [6, 13], а также зависимость 1. Причиной этого различия, наряду с постоянством теплоемкости, может быть постоянство коэффициента Грюнайзена, принятое в [3].

На рис. 2 видно, что температура вдоль «пористых» ударных адиабат существенно увеличивается. При этом «пористые» ударные адиабаты пересекают экстраполированную линию разложения тефлона в области невысокого давления ≈ 15 ГПа. На рис. 2 представлены результаты расчета температуры плавления по уравнению (13) с использованием (2), (8) и коэффициентов из табл. 1 (пунктирная линия). Кривая плавления проходит под кривой разложения. Оценочный характер кривых разложения и плавления не позволяет сделать точного прогноза, но в качестве предположения можно сказать, что разложение политетрафторэтилена, о котором шла речь в [13], происходит в жидкой фазе.

Хорошо известно, что в полуэмпирической модели типа Ми — Грюнайзена расчетная температура ударного сжатия существенно зависит от коэффициента Грюнайзена. В этой связи на рис. 3 сопоставлены данные работ [3, 13] и зависимость коэффициента Грюнайзена (9). При $V < 0.72V_0$ зависимость $\gamma(V)$ (9) согласуется с данными [3, 13] лишь с точностью ≈ 30 %. Однако, несмотря на такую разницу, согласие расчета с экспериментом на рис. 1, 2 позволяет считать это различие приемлемым для описания кинематических и термодинамических параметров ударного сжатия политетрафторэтилена при высоких давлениях вплоть до 170 ГПа.

Вместе с этим следует отметить, что в области низких давлений используемые значения коэффициента Грюнайзена существенно (в три раза) превышают его значение при комнатных условиях. Следовательно, при невысоких давлениях предлагаемые УРС содержат погрешность. Указать величину этой погрешности затруднительно. Поэтому в согласии с рис. 3 исключим область низких давлений из рассмотрения и ограничим область применения рассматриваемого УРС снизу объемом $V < 0.71V_0 = 16.34 \text{ см}^3/\text{моль}$, что соответствует

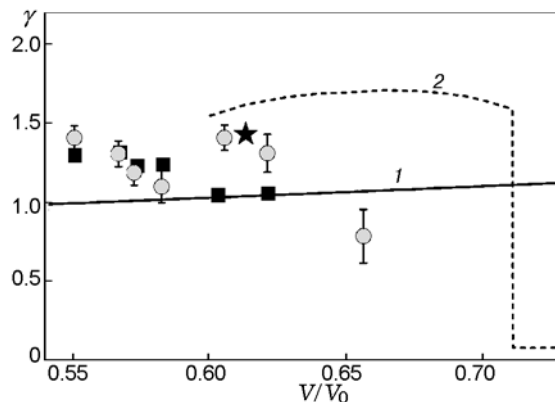


Рис. 3. Зависимость коэффициента Грюнайзена от объема для ударно-сжатого политетрафторэтилена:

кружки и квадраты — эксперимент [13], звездочка — эксперимент [3]; 1 — зависимость $\gamma(V)$ (9) для политетрафторэтилена, 2 — зависимость $\gamma(V)$ [13] для оптических мод, полученная путем подгонки под экспериментальные изоэнтропы

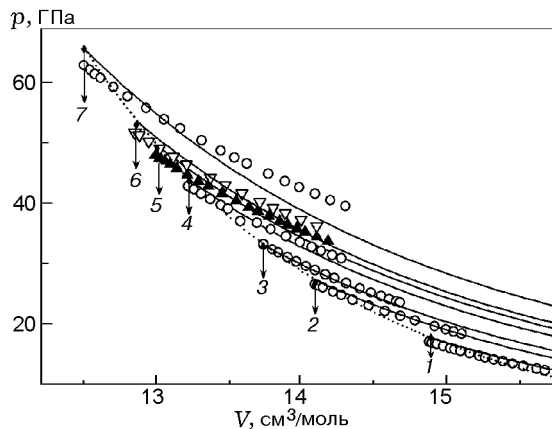


Рис. 4. Изоэнтропы расширения ударно-сжатого политетрафторэтилена в координатах «давление — объем»:

кружки и треугольники — изоэнтропы [13], стрелками отмечены объемы на ударной адиабате, из которых выходят изоэнтропы, цифры соответствуют нумерации изоэнтроп в [13], линии — расчеты данной работы, пунктирная линия — ударная адиабата

давлению $p \approx 10$ ГПа.

Изоэнтропы расширения ударно-сжатого политетрафторэтилена [13] показаны на рис. 4 кружками и треугольниками. На этом же рисунке представлены рассчитанные изоэнтропы для тех же объемов. Видно, что три первые из них совпадают с соответствующими изоэнтропами из [13]. Различия начинаются с изоэн-

тропы 4 и достигают максимума для изоэнтропы 7.

Итак, расчеты однократного ударного сжатия согласуются с экспериментом в диапазоне давления $10 \div 170$ ГПа, а для изоэнтропического расширения диапазон давления составляет $10 \div 40$ ГПа.

Предложенное УРС в явном виде не учитывает плавление и разложение политетрафторэтилена при сильном однократном ударном сжатии и поэтому заведомо является приближенным. Тем не менее тестирование предлагаемого УРС политетрафторэтилена по ударным адиабатам однократного сжатия показывает, что это уравнение состояния позволяет с удовлетворительной точностью рассчитывать кинематические и термодинамические параметры ударно-сжатого политетрафторэтилена в мегабарном диапазоне давления. Это означает, что выбор оптимальных значений подгоночных параметров в опорных функциях (2)–(9) предлагаемых УРС компенсирует пренебрежение плавлением и разложением политетрафторэтилена при расчете его сильного ударного сжатия.

ПРОВЕРКА УРС ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЭКСПЕРИМЕНТОВ СО СЛОИСТЫМИ МИШЕНЯМИ

Как хорошо известно, при ударном нагружении «мягкого» слоя, расположенного между двумя «жесткими», возникает многократное ударное сжатие «мягкого» слоя за счет реверберации ударных волн. Этот эффект может быть использован в экспериментах по 2–5-кратному ударному сжатию политетрафторэтилена. Ниже приведены результаты таких экспериментов.

На рис. 5 представлена схема двух типов ударно-волновых экспериментов по регистрации профилей скорости перемещения свободной поверхности и давления во время многократного ударного сжатия политетрафторэтиленового слоя, расположенного между двумя медными или вольфрамовыми пластинами.

В экспериментальной сборке продукты детонации взрывчатого вещества разгоняют плоский стальной (сталь 12X18H10T) ударник (слой 1) до скорости W_0 . Ударник сталкивается с мишенью, состоящей из набора слоев 2–8 различных материалов и толщин. Были выполнены два типа экспериментов. В первом с помощью лазерного интерферометра VISAR ре-

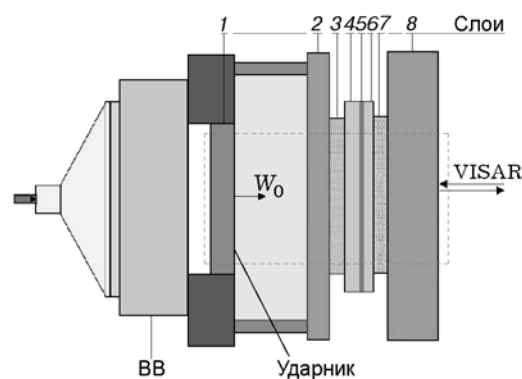


Рис. 5. Схема эксперимента по изучению многократного ударного сжатия политетрафторэтилена:

размеры и материалы ударника 1 и слоев 2–8 приведены в табл. 2, прямоугольник — моделируемая область в гидрокоде

гистрировалась скорость свободной поверхности тыльного слоя (медной пластины). Во втором варианте фторопластовый образец состоял из двух слоев (4 и 5), между ними располагался манганиновый датчик давления. Толщины и материалы слоев приведены в табл. 2. Исследуемые образцы представляли собой промышленную политетрафторэтиленовую пленку (лента фторопластовая Ф-4 ГОСТ 24222-80 «ПН» — прокладочная неориентированная) толщиной $0.4 \div 1.0$ мм. Измеренная плотность образцов составила $2.190(7)$ г/см³. Начальная температура экспериментальной сборки приблизительно равнялась комнатной (≈ 300 К).

Результаты экспериментов в постановке рис. 5 с параметрами из табл. 2 показаны на рис. 6, 7. Там же приведены профили, полученные в модельных расчетах с использованием гидрокода (см. приложение), опирающегося на предложенное выше уравнение состояния фазы высокого давления политетрафторэтилена. Видно, что на качественном уровне численное моделирование правильно передает детали этих ступенчатых профилей. Количественно расчет отличается от эксперимента по скорости свободной поверхности на $3 \div 4$ %, при этом по времени различие достигает 15 %. Несоответствие по давлению составляет $5 \div 15$ %, по времени — $3 \div 5$ %. Таким образом, предложенное уравнение состояния политетрафторэтилена может быть использовано в гидрокоде и позволяет предсказывать параметры многократного ударного сжатия политетрафторэтилена

Таблица 2
Параметры
экспериментальныхборок (см. рис. 5)
по регистрации профилей давления
и скорости свободной поверхности

Номер слоя	Материал	h_0 , мм
Сборка I		
1	Сталь	3.0(1)
2	Сталь	1.98(1)
3	W	1.54(1)
4	Ф-4	0.900(3)
5	Датчик	0.03
6	Ф-4	0.500(3)
7	W	1.53(1)
8	Сталь	4.1(1)
Сборка II		
1	Al	7.0(1)
2	Cu	3.99(1)
3	—	—
4	Ф-4	0.969(5)
5	—	—
6	—	—
7	—	—
8	Cu	1.973(5)

Примечания. I — экспериментальная сборка с манганиновым датчиком, II — экспериментальная сборка с VISAR, h_0 — толщина слоя. Стальные пластины (слои 1, 2, 8) изготовлены из нержавеющей стали 12X18H10T. Скорость стального ударника (слой 1) в сборке I — 3.15(5) км/с; скорость алюминиевого ударника (слой 1) в сборке II — 2.00(5) км/с.

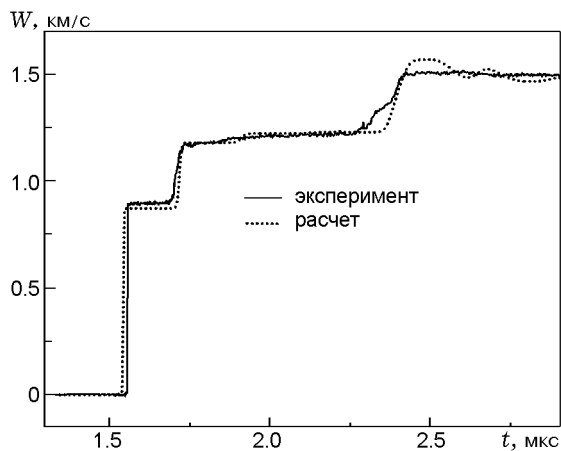


Рис. 6. Профиль скорости свободной поверхности тыльной пластины при многократном нагружении фторопласта-4 до 27 ГПа в постановке эксперимента, представленной на рис. 5

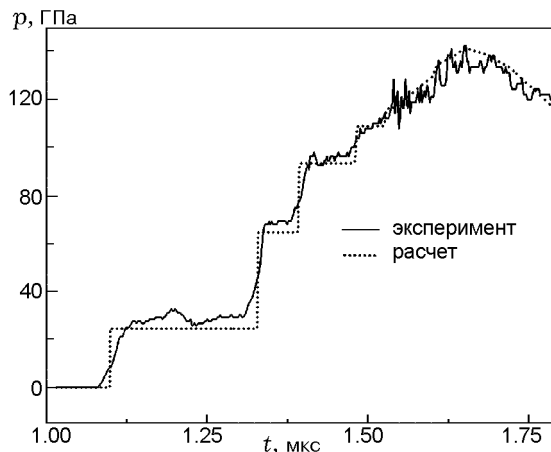


Рис. 7. Профиль давления в образце фторопласта-4 при его многократном нагружении до 140 ГПа в постановке эксперимента, представленной на рис. 5

в диапазоне давления $\approx 10 \div 140$ ГПа с точностью $\approx 5 \div 15$ %.

В заключение обсудим расчетные температуры и агрегатное состояние ударно-сжатого политетрафторэтилена в выполненных экспериментах. С этой целью рассмотрим местоположение расчетных фазовых траекторий (зависимостей температуры от давления вдоль экспериментальных профилей) многократного ударного сжатия в экспериментах с манганиновым датчиком и лазерным интерферометром. Видно (см. рис. 2), что в обоих случаях фазовые траектории лежат под кривой плавления. Это позволяет предположить, что в данных экспериментах ступенчатого ударного сжатия политетрафторэтилен остается в твердой фазе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлено полуэмпирическое описание термодинамических свойств политетрафторэтилена при высоких давлениях ударного сжатия. Расчеты кинематических и термодинамических параметров ударного сжатия политетрафторэтилена согласуются с экспериментальными данными по однократному и многократному ударному сжатию монолитных и пористых образцов этого полимера. Разработанные полуэмпирические уравнения состояния могут быть использованы в численных алгоритмах для описания свойств политетрафторэтилена в ударно-волновых экспериментах. Область применимости предлагаемых уравнений состояния — это динамическое (однократное и

многократное) сжатие политетрафторэтилена ударными волнами с амплитудами в диапазоне $10 \div 170$ ГПа.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ УДАРНОГО СЖАТИЯ

Полуэмпирическое приближение (см. [15]) для фоновой части свободной энергии твердого тела $F = F(V, T; \{a\})$, где V — удельный объем материала, T — его температура, $\{a\}$ — набор опорных констант, базируется на модели эйнштейновских осцилляторов:

$$F = E_x + 3R \left[\frac{\Theta}{2} + T \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\Theta}{T} \right) \right) \right], \quad (1)$$

$$\Theta = \Theta_0 \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_0} \right)^2 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3}, \quad (2)$$

$$v_0 = V_0 \left(1 + \frac{2}{\gamma_0 - 2/3} \right), \quad (3)$$

где R — удельная газовая постоянная, $\Theta = \Theta(V)$ — характеристическая температура, $\Theta_0 = \Theta(V_0, T_0)$, v_0 — параметр, имеющий смысл характеристического объема, $\gamma_0 = \gamma_0(V_0, T_0)$ — параметр Грюнайзена, V_0 — начальный объем, T_0 — начальная температура.

Подгоночный параметр v_x входит в выражение для потенциальной энергии $E_x = E_x(V)$:

$$E_x = -v_x(C_1 H_x + C_2 x) + C_3, \quad (4)$$

$$H_x = 9 \left(\frac{1}{10} x^{-2/3} + 2x^{1/3} + \frac{3}{2} x^{4/3} - \frac{1}{7} x^{7/3} + \frac{1}{70} x^{10/3} \right), \quad (5)$$

$$x = V/v_x, \quad (6)$$

где C_1, C_2, C_3 — константы, выражаемые через справочные свойства материала и параметр v_x .

Согласно термодинамическим тождествам, калорическое уравнение состояния $E = E(V, T; v_x) = F - T(\partial F/\partial T)$, т. е. зависимость внутренней энергии E от объема

и температуры, в модели эйнштейновских осцилляторов имеет вид

$$E = E_x + 3R\Theta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta/T) - 1} \right). \quad (7)$$

Термическое уравнение состояния $P = P(V, T; v_x) = -\partial F/\partial V$, т. е. зависимость давления от объема и температуры, записывается в этой же модели в виде

$$P = 3C_1 \left(-\frac{1}{5} x^{-5/3} + 2x^{-2/3} + 6x^{1/3} - x^{4/3} + \frac{1}{7} x^{7/3} \right) + C_2 + 3R \frac{\gamma}{V} \Theta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta/T) - 1} \right), \quad (8)$$

где $\gamma = \gamma(V)$ — зависимость коэффициента Грюнайзена от объема,

$$\gamma = -\frac{\partial \ln \Theta}{\partial \ln V} = \frac{2}{3} + \frac{2V}{v_0 - V}. \quad (9)$$

Таким образом, полуэмпирическое описание (1) предполагает независимость Θ и γ от температуры. При этом соотношение (1) содержит единственный подгоночный параметр v_x . Остальные параметры V_0, Θ_0, γ_0 вместе с модулем объемного сжатия K_{0t} , необходимые для вычисления по (1)–(9), представляют собой теплофизические свойства материала при начальных условиях. Эти параметры определяются экспериментально или теоретически и, как правило, в справочной литературе приведены для начального состояния (V_0, P_0, T_0) .

Расчет давления P_h , энергии E_h и температуры T_h при заданном объеме V_h ударно-сжатого материала осуществляется в результате решения системы трех уравнений:

$$P_h = P_x + 3R\Theta \left(\frac{\gamma}{V_h} \right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta/T_h) - 1} \right), \quad (10)$$

$$E_h = E_0 + \frac{1}{2} (P_h + P_0)(V_0 - V_h), \quad (11)$$

$$T_h = \frac{\Theta}{\ln(1 + F_E)}, \quad (12)$$

где $F_E = \left(\frac{E_h - E_x}{3R\Theta} - \frac{1}{2} \right)^{-1}$. Уравнение (10) является термическим уравнением состояния (8), уравнение (11) представляет собой закон сохранения энергии на ударном фронте, для получения уравнения (12) используется калорическое уравнение состояния (7). Система (10)–(12) решается методом итераций. Значение T_h на первом шаге итераций составляет $T_h = T_0$. Энергия E_0 в уравнении (11) рассчитывается с помощью (7) как $E_0 = E(V_0, T_0)$. Величина $V_{00} = mV_0$ представляет собой начальный объем материала с учетом коэффициента m — отношения плотности монолитного образца к плотности пористого образца.

Кривая плавления, рассчитанная на основе критерия Линдемана, выражается с помощью (2) как

$$T_{ml} = T_{m0} \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_{m0}} \right)^4 \left(\frac{V_{m0}}{V} \right)^{2/3}, \quad (13)$$

где T_{m0} и V_{m0} — температура и объем в начальной точке кривой плавления при давлении P_{m0} .

Зависимость характеристической температуры (2) и коэффициента Грюнайзена (9) от температуры в виде $\Theta = \Theta(V, T)$ и $\gamma = \gamma(V, T)$ могут быть учтены в выражении (3) с помощью подгоночного параметра β_T [16]:

$$v_0 = v_0(T) = V_0 \left(1 + \frac{2}{\gamma_0 - 2/3} + \beta_T(T - T_0) \right), \quad (14)$$

где первым приближением для β_T является коэффициент объемного теплового расширения при начальной температуре (для компактности выкладок множитель 2β из [16] в последнем слагаемом (14) заменен множителем β_T). В этом случае термическое уравнение состояния (8) и коэффициент Грюнайзена (9) сохраняют прежний аналитический вид, но с учетом того, что теперь v_0 (3) зависит от температуры в виде (14). Калорическое уравнение состояния с учетом (14) приобретает вид

$$E = E_x + 3R\Theta(1 + \gamma_T) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta/T) - 1} \right), \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_T &= -\frac{\partial \ln \Theta}{\partial \ln T} = \\ &= 2\beta_T T \left(\frac{V_0}{v_0 - V_0} - \frac{V_0}{v_0 - V} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

— вспомогательная функция.

Коэффициенты для полуэмпирического описания политетрафторэтилена с помощью соотношений (2)–(16) приведены в табл. 1.

ГИДРОКОД ДЛЯ РАСЧЕТА СЛОИСТЫХ МИШЕНЕЙ

В основе разработанного одномерного гидрокода лежит модификация численного метода индивидуальных частиц. В этом методе непрерывная идеальная невязкая сжимаемая среда представляется в виде ансамбля конечно-размерных (т. е. вполне определенного размера) лагранжевых частиц, движущихся через неподвижную равномерную регулярную эйлерову сетку. Для расчета разрывных решений (ударные волны) используется метод добавления искусственного вязкого давления (линейный и квадратичный члены). Метод обладает первым порядком точности по пространству/времени; шаг по времени определяется из условия устойчивости Куранта и позволяет рассчитывать сложные течения с множеством границ раздела, большими градиентами плотности и давления. Газодинамический код разработан на основе [17, 18]. Для замыкания системы уравнений сохранения Эйлера и определения термодинамических параметров используются уравнения состояния (7) и (8) для каждого слоя, получаемые дифференцированием полуэмпирического выражения (1) для фононной части свободной энергии твердого тела.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Vantine H. C., Erickson L. M., Janzen J. A.** Hysteresis-corrected calibration of manganin under shock loading // *J. Appl. Phys.* — 1980. — V. 51. — P. 1957–1962.
2. **Бордзиловский С. А., Караханов С. М.** Электроизоляционные свойства фторопластовых прокладок при динамическом сжатии // *Физика горения и взрыва.* — 1990. — Т. 26, № 4. — С. 124–129.
3. **Гаржанов В. И., Жугин Ю. Н., Крупников К. К.** Электропроводность политетрафторэтилена при нагружении ударными волнами и разгрузке // *ПМТФ.* — 1997. — Т. 38, № 6. — С. 16–22.

4. **Бордзиловский С. А., Караханов С. М.** Электросопротивление политетрафторэтилена при ударном сжатии // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 6. — С. 127–133.
5. **Бушман А. В., Жерноклетов М. В., Ломоносов И. В., Сутулов Ю. Н., Фортвов В. Е., Хищенко К. В.** Исследование плексигласа и тефлона в волнах повторного ударного сжатия и изэнтропической разгрузки. Уравнение состояния полимеров при высоких плотностях энергии // Докл. АН. — 1993. — Т. 329, № 5. — С. 581–584.
6. **Бордзиловский С. А., Караханов С. М., Бордзиловский Д. С.** Применение оптического пирометра для измерения температуры ударного сжатия фторопласта // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 1. — С. 93–101.
7. **Champion A. R.** Shock compression of teflon from 2.5 to 25 kbars. — Evidence for a shock-induced transition // J. Appl. Phys. — 1971. — V. 42, N 13. — P. 5546–5550.
8. **LASL Shock Hugoniot Data / S. P. Marsh (Ed.).** — Berkeley: Univ. California Press, 1980.
9. **Калашников Н. Г., Кулешова Л. В., Павловский М. Н.** Ударное сжатие политетрафторэтилена до давлений ~ 1.7 Мбар // ПМТФ. — 1972. — № 4. — С. 187–191.
10. **Compendium of Shock Wave Data / M. van Thiel (Ed.).** — Livermor: Univ. California, 1977.
11. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
12. **Чегодаев Д. Д., Наумова З. К., Дунаевская Ц. С.** Фторопласты. — Л.: ГХИ, 1960.
13. **Morris C. E., Fritz J. N., McQueen R. G.** Equation of state of polytetrafluoroethylene to 80 GPa // J. Chem. Phys. — 1984. — V. 80, N 10. — P. 5203–5218.
14. **Tamayama B. M., Andersen T. N., Eyring H.** The melting and pyrolysis of teflon and the melting of silver chloride and iodine under high pressure // Proc. Natl. Acad. Sci. — 1967. — V. 57. — P. 554–561.
15. **Molodets A. M.** Thermodynamic potentials and non-monotonic melting curve of sodium at high pressure // High Pressure Res. — 2010. — V. 30, N 2. — P. 325–331.
16. **Молодец А. М.** Уравнение состояния твердых химических элементов // Докл. АН. — 1997. — Т. 353, № 5. — С. 610–612.
17. **Ким В. В.** Численное моделирование газодинамических процессов при высоких плотностях энергии модифицированным методом индивидуальных частиц: дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Черногловка, 2005.
18. **Fortov V. E., Kim V. V., Lomonosov I. V., Matveichev A. V., Ostric A. V.** Numerical modeling of hypervelocity impacts // Intern. J. Impact Eng. — 2006. — V. 33. — P. 244–253.

*Поступила в редакцию 20/VII 2012 г.,
в окончательном варианте — 2/X 2012 г.*
