

В этих условиях, пренебрегая членами, содержащими d_i в качестве сомножителей, неравенства (1.7) — (1.9) можно записать в виде

$$(5.1) \begin{cases} r = E_D > 0, c^2 = v^2 E_{vv} + (2/3) E_D > 0, \\ l = v E_{vS} < 0, T = E_S > 0, g = -E_D < 0, \\ q = -2E_D + 2v E_{vD} + v^2 E_{vvv} + (4/3) E_\Delta < 0, a^2 = v^2 E_{vv} > 0. \end{cases}$$

Достаточными условиями для выполнения условий (5.1) являются неравенства

$$E_D > 0, E_{vv} > 0, E_{vS} < 0, E_{vD} < 0, E_{vvv} < 0, E_\Delta < 0,$$

которые выполнены для интерполяционных формул уравнений состояний $E(v, D, S)$, приведенных в [3].

Автор выражает благодарность С. К. Годунову и Е. И. Роменскому за интерес к работе.

Поступила 3 XI 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Годунов С. К., Козин Н. С. Структура ударных волн в упруговязкой среде с нелинейной зависимостью максвелловской вязкости от параметров вещества.— ПМТФ, 1974, № 5.
2. Курант Г., Фридрихс К. Сверхзвуковые течения и ударные волны. М., ИЛ, 1950.
3. Годунов С. К., Козин Н. С., Роменский Е. И. Уравнение состояния упругой энергии металлов при нешаровом тензоре деформаций.— ПМТФ, 1974, № 2.

УДК 539.21

УДАРНЫЕ АДИАБАТЫ ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ

В. А. Жданов, В. В. Поляков

(Томск)

Беспараметрический расчет ударных адиабат дает возможность связать параметры ударного сжатия материала, непосредственно определяемые в эксперименте, с параметрами, характеризующими свойства материала на атомном уровне. Установление такой связи является необходимым звеном в предварительном вычислении параметров ударного сжатия, имеющем существенное значение при планировании эксперимента, а также в проблемах, связанных с конструированием материалов с заданными оптимальными свойствами.

Беспараметрический расчет ударных адиабат щелочно-галлоидных кристаллов интересен тем, что эти кристаллы в значительной мере изучены экспериментально, что обеспечивает экспериментальную проверку расчетов. В то же время, учитывая, что многие неорганические материалы, в том числе ситаллы, стекла, керамика, а также некоторые взрывчатые вещества имеют ионные или преобладающие ионные связи, изучение

щелочно-галогидных кристаллов является необходимым для перехода к рассмотрению поведения этих материалов в условиях ударного сжатия.

Ударная адиабата $P_{\Gamma}(V)$ может быть рассчитана по формуле [1]

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

где $U(V)$ — энергия связи деформируемой решетки; $P_x(V)$ — давление на нулевой изотерме; $\gamma(V)$ — коэффициент Грюнайзена; V_0 и E_0 — объем и внутренняя энергия свободного кристалла с решеткой В1 при комнатной температуре. Статистическое приближение квантовой теории твердого тела дает возможность провести расчет функций $U(V)$ и $P_x(V)$ без привлечения экспериментальных данных [2]. В этом приближении, являющемся квазиклассической формой метода Хартри — Фока, функция энергии связи кристаллической решетки выражается через функции плотности распределения электронов в кристалле и в структурных элементах. Для ионных кристаллов за структурные элементы принимаем свободные ионы, предполагая, что плотности распределения электронов в ионах не изменяются при объединении их в решетку, что, как показывают расчеты для щелочно-галогидных кристаллов, является хорошим приближением. Получаем функцию энергии связи в виде [3]

$$U = \frac{e^2}{2} \sum'_{ab} \frac{Z_a Z_b}{|R_a - R_b|} - e^2 \sum'_{ab} \int \frac{Z_a \rho_b(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - R_a|} d\mathbf{r} + \\ + \frac{e^2}{2} \sum'_{ab} \int \int \frac{\rho_a(\mathbf{r}) \rho_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \frac{1}{2} \sum'_{ab} \int \{ \hat{R}[\rho_a + \\ + \rho_b] - \hat{R}[\rho_a] - \hat{R}[\rho_b] \} d\mathbf{r},$$

где Z_a и R_a — заряд и радиус-вектор a -го ядра; $\rho_a(\mathbf{r})$ — функция плотности распределения электронов в a -м ионе; нелинейный оператор \hat{R} определяется соотношением

$$\hat{R}[f] = \kappa_h f^{5/3} + \kappa_e f^{4/3}, \\ \kappa_h = 3^{5/3} \pi^{4/3} \hbar^2 / 10m, \quad \kappa_e = -3^{4/3} e^2 / 4\pi^{1/3}.$$

Электронные плотности $\rho_a(\mathbf{r})$ строятся по волновым функциям, найденным решением уравнений Хартри — Фока для изолированных ионов. В [4] на основе функций энергии связи, полученных в статистическом приближении, построены ударные адиабаты NaCl, которые оказались в хорошем согласии с экспериментом, что является подтверждением правильности моделей и приближений, заложенных в основу беспараметрического расчета.

В данной работе проводим аналогичные расчеты для кристаллов LiBr, NaBr, KBr, RbF, RbCl, RbBr. Для этого получены беспараметрические уравнения состояния рассматриваемых кристаллов в фазах В1 (решетка NaCl) и В2 (решетка CsCl), сопоставление которых с экспериментом в области статических давлений подтвердило их правильность. Ударные адиабаты решеток В1 вычислялись по (1) с рассчитанными значениями V_0 и E_0 ; расчеты для решеток В2 проводились по (1) с теми же параметрами начального состояния и с $U(V)$, $P_x(V)$ и $\gamma(V)$, относящимися к фазе В2.

Полученные давления ударного сжатия $P_{\Gamma}(V)$ приведены в табл. 1, там же приведены давления P_x и энергии E_x нулевых изотерм как функции относительного сжатия V_0/V . В табл. 2 представлены вычисленные значения удельных объемов V_0 , они близки к экспериментальным

Таблица 1

Химическое соединение	Фаза В1				Фаза В2			
	V_0/V	$E, \frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$	$P_x, \text{кбар}$	$P_r, \text{кбар}$	V_0/V	$E, \frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$	$P_x, \text{кбар}$	$P_r, \text{кбар}$
LiBr	1,12	1,1	40	47	1,37	7,8	86	90
	1,20	2,8	75	85	1,46	10	137	158
	1,28	5,4	119	136	1,55	14	204	256
	1,36	9,2	177	205	1,66	19	288	396
	1,56	22	346	434	1,77	26	395	602
	1,80	42	618	896	1,89	35	532	918
NaBr	1,13	1,3	29	33	1,39	6,3	57	64
	1,26	5,2	78	87	1,47	8,8	90	110
	1,42	13	157	184	1,64	16	180	260
	1,50	19	212	259	1,74	22	246	392
	1,60	26	282	365	1,84	30	326	587
	1,69	36	369	514	1,95	39	425	896
KBr	1,12	1,1	21	26	1,31	3,8	22	24
	1,17	2,5	38	44	1,37	5,1	41	51
	1,23	4,6	60	69	1,45	7,3	67	89
					1,52	10	98	142
					1,60	14	138	219
					1,69	19	187	333
				1,79	25	248	511	
RbF	1,06	0,4	15	21	1,30	4,4	36	39
	1,12	1,6	43	50	1,37	6,3	76	92
	1,19	3,6	79	90	1,46	9,2	128	171
	1,27	6,8	126	145	1,55	13	194	288
					1,64	19	281	469
					1,75	26	386	752
RbCl	1,14	1,4	26	30	1,33	4,2	28	31
	1,19	3,0	44	49	1,40	5,6	48	59
	1,26	5,4	66	75	1,47	8,1	75	98
					1,55	11	107	153
					1,63	15	149	232
					1,72	21	200	348
				1,82	28	265	530	
RbBr	1,12	1,1	18	22	1,31	3,2	17	20
	1,16	2,5	33	37	1,37	4,6	35	44
	1,22	4,6	52	58	1,44	6,6	56	76
					1,51	9,4	83	122
					1,59	13	117	189
					1,67	18	158	287
				1,75	24	210	442	

данным [5]. Коэффициенты Грюнайзена $\gamma(V)$ вычислялись с использованием формулы Зубарева — Ващенко [6]. Значения $\gamma(V_0)$ для свободных решеток, приведенные в табл. 2, хорошо согласуются с экспериментальными величинами [7—9].

Данные табл. 1 и 2 могут быть использованы для получения скалярных уравнений состояния щелочно-галогидных кристаллов, соответствующих гидростатическому сжатию. Для сравнения результатов расчета с результатами статических измерений, проведенных при комнатной температуре, нужно брать давление P_x как функцию относительного сжатия V_{0K}/V , где V_{0K} — рассчитанный объем свободного кристалла с решеткой В1 при температуре $T = 0\text{K}$.

Таблица 2

Химические соединения	V_0 , см ³ /г		V_{0K} , см ³ /г	$\gamma(V_0)$	
	расчет	экспериментальные данные [5]	расчет	расчет	экспериментальные данные [7-9]
LiBr	0,255	0,289	0,250	1,38	1,94
NaBr	0,325	0,312	0,319	1,58	1,65
KBr	0,342	0,363	0,335	1,75	1,50
RbF	0,254	0,259	0,249	1,71	1,40
RbCl	0,343	0,355	0,336	1,73	1,39
RbBr	0,284	0,298	0,278	1,86	1,42

На фиг. 1 представлены рассчитанные ударные адиабаты кристаллов LiBr и KBr (экспериментальные данные: 1 — из [10]; 2 — из [11]; 3 — из [12]). В случае LiBr экспериментальные точки из [10] находятся в хорошей корреляции с кривой фазы B1; переход к плотной фазе экспериментально не установлен. В случае KBr фазовый переход имеет место в области низких давлений. В районе перехода расположение экспериментальных точек из [11] хорошо соответствует рассчитанным кривым фаз B1 и B2. При более высоком давлении экспериментальные данные [11, 12] близки к рассчитанной кривой фазы B2. При давлениях выше ~400 кбар экспериментальные точки значительно отклоняются от кривой фазы B2, что, по-видимому, вызвано происходящим в этой области плавлением [13]. Экспериментальных данных для $P_{\Gamma}(V)$, относящихся к другим кристаллам, приведенным в табл. 1, в нашем распоряжении не имеется.

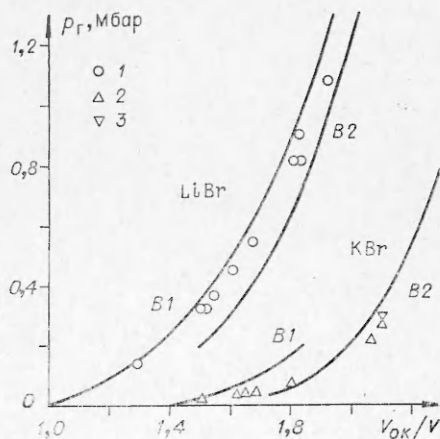
Полученные ударные адиабаты кристаллов LiBr, NaBr, KBr, RbF, RbCl, RbBr позволили рассчитать соотношения между скоростью ударной волны D и массовой скоростью u , доступные непосредственной экспериментальной проверке. Для расчета были использованы следующие из законов сохранения соотношения

$$D(V) = \sqrt{P_{\Gamma}(V_0 - V)}, \quad u(V) = V_0 \sqrt{P_{\Gamma}(V_0 - V)},$$

в которых P_{Γ} и V_0 взяты из наших расчетов. Связь между D и u , полученная с помощью табличных значений $P_{\Gamma}(V)$, в широком интервале скоростей хорошо интерполируется функцией вида

$$(2) \quad D = a + bu.$$

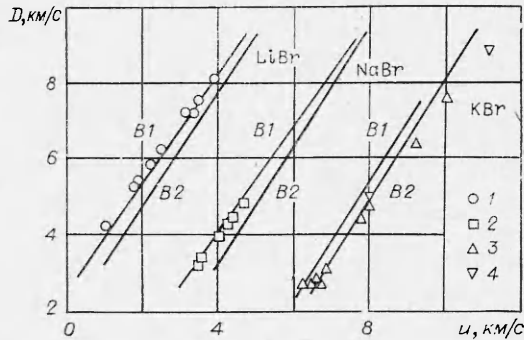
В табл. 3 приведены параметры a и b , найденные из рассчитанных скоростей D и u по методу наименьших квадратов для фаз B1 и B2 (величины, отмеченные звездочкой, относятся к фазе B2) рассматриваемых кристаллов. Как видно из табл. 3, переход от фазы B1 к фазе B2 связан с увеличением наклона прямой (2) и с уменьшением параметра a . Результаты расчета параметров a и b хорошо согласуются с экспериментальными значениями [14] для обеих фаз. На фиг. 2 показано расположение экс-



Фиг. 1

Таблица 3 $D, \text{км/с}$

Химическое соединение	Параметры ($a, \text{км/с}$)	Расчет	Экспериментальные данные [14]	Расчет
LiBr	a	2,58	2,6	1,89*
	b	1,40	1,4	1,51*
NaBr	a	2,59	2,6	1,93*
	b	1,43	1,3	1,53*
KBr	a	2,34	—	1,69*
	b	1,53	—	1,62*
RbF	a	2,62	—	2,12*
	b	1,53	—	1,62*
RbCl	a	2,47	1,5*	1,74*
	b	1,50	1,6*	1,61*
RbBr	a	2,09	1,4*	1,44*
	b	1,60	1,6*	1,67*



Фиг. 2

периментальных точек по отношению к рассчитанным прямым (2) для кристаллов LiBr, NaBr и KBr (1 — из [10]; 2 — из [15]; 3 — из [11]; 4 — из [12]). Это расположение для LiBr и KBr полностью согласуется с фиг. 1; в случае NaBr экспериментальные точки, взятые с графической точностью из [15], хорошо укладываются на рассчитанную прямую, соответствующую фазе B1.

Расчет ударных адиабат кристалла RbF, экспериментальные значения которых неизвестны, является примером предварительного вычисления параметров ударного сжатия. Полученные результаты могут рассматриваться как модели, которые должны учитываться при интерпретации экспериментальных данных.

Поступила 18 IX 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., «Наука», 1966.
2. Жданов В. А., Поляков В. В., Конусов В. Ф. Уравнения состояния хлористого натрия. — ФТТ, 1973, т. 15, с. 3439.
3. Жданов В. А., Поляков В. В., Конусов В. Ф. Энергия связи и уравнения состояния гидрида лития. — «Теор. и exper. химия», 1974, т. 10, с. 276.
4. Жданов В. А., Поляков В. В. Беспараметрический расчет ударной адиабаты хлористого натрия. — ФТТ, 1975, т. 17, с. 1178.
5. Vaidya S. N., Kennedy G. C. Compressibility of 27 halides to 45 kbar. — «J. Phys. Chem. Solids», 1971, vol. 32, p. 951.
6. Ващенко В. Я., Зубарев В. П. О коэффициенте Грюнайзена. — ФТТ, 1963, т. 5, с. 886.
7. Roberts R. B., Smith C. S. Ultrasonic parameters in the Born model of the sodium and potassium halides. — «J. Phys. Chem. Solids», 1970, vol. 31, p. 619.
8. Roberts R. B., Smith C. S. Ultrasonic parameters in the Born model of the rubidium halides. — «J. Phys. Chem. Solids», 1970, vol. 31, p. 2397.
9. McLean K. O., Smith C. S. Ultrasonic parameters in the Born model of the lithium halides. — «J. Phys. Chem. Solids», 1972, vol. 33, p. 279.
10. Carter W. J. Hugoniot equations of state of some alkali halides. — «High Temp. — High Pressur.», 1973, vol. 5, p. 313.
11. Альтшулер Л. В., Павловский М. Н., Куленова Л. В., Симаков Г. В. Исследование галогенидов щелочных металлов при высоких давлениях и температурах ударного сжатия. — ФТТ, 1963, т. 5, с. 279.
12. Корнер С. Б., Синицын М. В., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Блинов А. В. Исследование сжимаемых пятиионных соединений до давлений 5 Мбар. — ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 1202.

13. Кормер С. Б., Синицын М. В., Кириллов Г. А., Урлин В. Д. Экспериментальное определение температур ударно-сжатых NaCl и KCl и их кривых плавления до давления 700 кбар. — ЖЭТФ, 1965, т. 48, с 1032.
14. Жарков В. П., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., «Наука», 1968.
15. Demarest H. H., Jr. Hugoniot curves and the Grüneisen parameters at high pressure for the alkali halides. — «J. Phys. Chem. Solids», 1974, vol. 35, p. 1393.

УДК 539.89

УДАРНЫЕ ВОЛНЫ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ЖЕЛЕЗЕ

Н. Х. Ахмадеев, Р. И. Нигматуллин

(Уфа, Москва)

Процессы ударного сжатия некоторых твердых веществ (железо, углерод, KCl, KBr, кварц, многие горные породы) сопровождаются при превышении соответствующих давлений p_s фазовыми переходами, т. е. образованием новых кристаллических фаз [1]. Изменение возникающих при этом волновых конфигураций [2—4] позволило определить характерные времена этих переходов, которые составляют 0,2—0,4 мкс. В [5—7] разработана односкоростная однотемпературная модель двухфазной упругопластической среды, которая использовалась для исследования нестационарных ударных волн в армо-железе с фазовыми переходами, а на основе связи фазовых переходов с упрочнением определена кинетика фазовых превращений $\alpha \rightleftharpoons \varepsilon$ в железе.

В данной работе проводится исследование распространения ударных волн в армо-железе в свете новых экспериментов [3, 4], в которых с помощью манганиновых датчиков и светового интерферометра непосредственно зафиксирована многоволновая структура ударных волн разной интенсивности. В условиях этих экспериментов рассчитано движение ударных волн, на фронте которых происходят фазовые превращения. Исследована и предложена более точная, чем в [6, 7], кинетика фазовых превращений.

1. Основные уравнения в лагранжевых координатах (r, t) для случая одномерного движения при одноосном деформировании имеют вид

$$\begin{aligned}
 (1.1) \quad & (\rho_0/\rho) \partial \rho_1 / \partial t + \rho_1 \partial v / \partial r + (\rho_0/\rho) I_{12} = 0, \\
 & (\rho_0/\rho) \partial \rho_2 / \partial t + \rho_2 \partial v / \partial r - (\rho_0/\rho) I_{12} = 0 \\
 & (\rho_i = \rho_i^0 \alpha_i, \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \rho = \rho_1 + \rho_2, i = 1, 2), \\
 & \rho_0 \partial v / \partial t = \partial \sigma^{11} / \partial r, \\
 & \rho_0/\rho [\rho_1 \partial e_1 / \partial t + \rho_2 \partial e_2 / \partial t + (e_2 - e_1) I_{12}] = \sigma^{11} \partial v / \partial r, \\
 & \sigma^{11} = -p + \tau^{11}, p = p_1(\rho_1^0, T) = p_2(\rho_2^0, T), \\
 & d\tau^{11} / dt = (4/3) \mu (\rho_0/\rho) \partial v / \partial r, \quad \tau^{11} \leq \tau^*,
 \end{aligned}$$

где ρ_i , ρ_i^0 , α_i , e_i — средняя плотность, истинная плотность, объемное содержание и удельная внутренняя энергия i -й фазы; ρ , v , T — плотность, скорость и температура; σ^{11} , τ^{11} , p — тензор напряжений, девиатор напряжений и гидростатическое давление в среде; μ , τ^* — модуль сдвига и предел текучести, для описания которого используется условие текучести