

Факт роста $\delta_{кр}$ от степени разбавления гремучей смеси азотом обусловлен увеличением периода индукции самовоспламенения горючей смеси. Скорость боковой разгрузки при этом практически не изменяется.

Представляет интерес сопоставить результаты расчета с экспериментом. Однако опытные данные имеются лишь для неразбавленной

гремучей смеси [3, 4]. В работе [3] найдено, что $\delta_{кр} = 0,5$ см, в [4] $\delta_{кр} > 1,0$ см. В экспериментах [3] горючая смесь и инертная среда были отделены друг от друга тонкой нитроцеллюлозной пленкой толщиной 10 мкм, которая, возможно, влияет на процесс распространения детонационной волны. В [4] опыты по определению $\delta_{кр}$ для гремучей смеси выполнены без применения пленки, и именно эти условия моделировали в настоящей работе. Расхождение опытных данных [4] и расчетов настоящей работы обусловлено, вероятно, приближенным описанием кинетики химических реакций. В связи с этим, результаты настоящей работы носят в основном качественный характер, передавая характер зависимости $\delta_{кр}$ от степени разбавления гремучей смеси азотом. Для количественного описания распространения детонационных волн в газовых объемах конечной толщины необходимо более детальное описание химической кинетики. Здесь возможны, например, полный учет элементарных стадий, как это сделано в работе [8], а также полуэмпирическая аппроксимация реакции в высокотемпературной области [9].

Поступила в редакцию 30/IV 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Н. Дремин, С. В. Савров и др. Детонационные волны в конденсированных средах. М.: Наука, 1970.
2. К. Tanaka, Т. Hikiita. Acta Astronaut., 1976, 3, 1005.
3. Е. К. Dehora, I. A. Nicholls, R. B. Morrisov. 10-th Symp. (Intern.) on Combustion, 1965.
4. А. А. Васильев. ФГВ, 1982, 18, 3, 98.
5. М. Ф. Иванов, В. Е. Фортов, А. А. Борисов. ФГВ, 1981, 17, 3, 108.
6. В. И. Димитров. Простая кинетика. Новосибирск: Наука, 1982.
7. В. В. Жаровцев. ЖВМ и МФ, 1977, 17, 5, 1320.
8. R. Atkinson, D. C. Bull, P. J. Shuff. Comb. Flame, 1980, 39, 3, 287.
9. Ю. А. Николаев. ФГВ, 1978, 14, 2, 73.

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И УДАРНЫХ АДИАБАТ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

В. Ф. Анисичкин
(Новосибирск)

Аналитические представления потенциалов межмолекулярного взаимодействия и связанных с ними кривых «холодного» сжатия и ударных адиабат конденсированных сред во многих отношениях более удобны, чем графические или табличные.

Описания достаточно сложных квантовомеханических расчетов межмолекулярных взаимодействий содержатся, например, в работе [1] для малых плотностей, в [2] — для очень больших (см. также ссылки

в [1, 2]). Результаты таких вычислений, однако, сложны и пока не всегда совпадают с экспериментальными данными в практически важном диапазоне умеренных и больших плотностей. Вследствие этого часто используют более простые модельные потенциалы. Так, в [3] методами неравновесной молекулярной динамики численно изучается поведение ударно-сжимаемой конденсированной среды с использованием потенциала Леннарда — Джонса (12—6).

Цель настоящей работы — найти достаточно точные и в то же время удобные в оценках и расчетах интерполяционные записи потенциалов межмолекулярного взаимодействия, кривых «холодного» сжатия и ударных адиабат конденсированных сред при умеренных плотностях.

В работе [4] предложены хорошо описывающие экспериментальные данные аналитические представления ударных адиабат плотных веществ в координатах массовая скорость, скорость ударной волны, но в координатах относительный объем V/V_0 , давление p их аналитические записи выглядят громоздко.

Анализ большого числа экспериментальных данных, взятых в основном из [5], показал, что ударные адиабаты веществ, выделенных в [4] в первую группу, включающую элементы первой половины каждого периода системы Д. И. Менделеева, могут быть с хорошей точностью представлены соотношением

$$p_r(V_0/V) = a \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^n - \frac{V_0}{V} \right], \quad (1)$$

где a — постоянная для каждого вещества; $n = 4$. Ударные адиабаты оставшихся химических элементов, выделенных в [4] во вторую группу, описываются соотношением (1) с $n = 4,76$, a — коэффициенты пропорциональности ударных адиабат для каждой из двух групп как эмпирические зависимости от начальной плотности, молекулярного веса и заряда ядра приведены в [4]. Показатели степеней в соотношении (1) приближенные, средние расчетные для ряда веществ. В качестве сравнения можно указать, что показатели степеней в (1), например для Та, равны 3,85 и 0,8 соответственно, а для Си — 4,63 и 1,11.

Если воспользоваться предложенной в [4] связью кривой «холодного» сжатия вещества и его ударной адиабатой

$$\Delta p_r / \Delta p_x = V_0 / V, \quad (2)$$

то кривые «холодного» сжатия p_x веществ первой и второй групп можно приближенно записать, согласно (1) и (2), как

$$p_x = a[(V_0/V)^{n-1} - 1]. \quad (3)$$

О возможности описания кривых «холодного» сжатия функциями типа (3) говорится в [6]. Новое в настоящей работе то, что выделены два основных типа кривых «холодного» сжатия.

Интерполяционные зависимости (1) и (3) удовлетворительно описывают имеющиеся данные по ударной и «холодной» сжимаемостям при $V < V_0$, но приводят к физически неверному потенциалу межмолекулярного взаимодействия при плотностях, меньших нормальной.

Более реалистично выглядит потенциал Букингема — Корнера

$$\varphi(r) = c \{ 6 \exp [\alpha(1 - r/r^*)] - \alpha(r^*/r)^6 \}, \quad (4)$$

где c , α и r^* — постоянные для данного вещества. Кривая «холодного» сжатия вещества, молекулы которого взаимодействуют по закону (4), будет иметь вид

$$p_x(V/V_0) = A \{ \exp \alpha [1 - (V/V_0)^{1/3}] - (V_0/V)^{7/3} \}, \quad (5)$$

где постоянная A характеризует индивидуальное вещество, а α — крутизна экспоненциального отталкивания.

Ударная адиабата любого вещества может быть в свою очередь получена из (5) с помощью соотношения (2). В соответствии с утвержде-

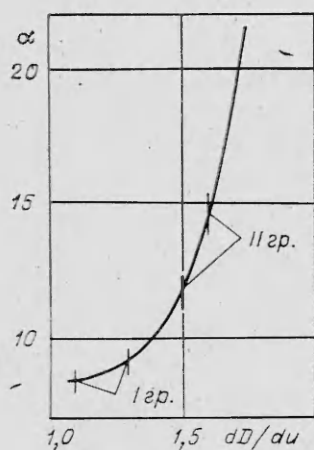


Рис. 1.

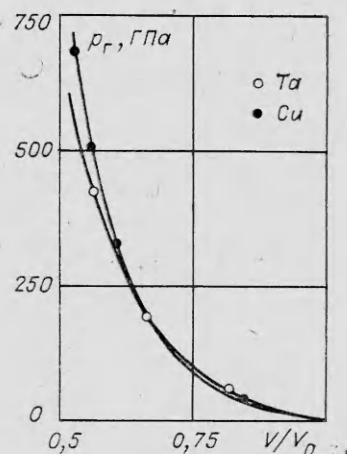


Рис. 2.

нием [4] о том, что ударные адиабаты всех конденсированных веществ делятся на две группы по величине производной dD/du , в координатах D — скорость ударной волны, u — массовая скорость: Для веществ первой группы $dD/du = 1,225 \pm 0,1$, а второй группы — $dD/du = 1,55 \pm 0,1$ при $V/V_0 = 0,675$. Постоянная α также принимает два значения, являясь функцией наклона ударной адиабаты. Зависимость $\alpha = \alpha(dD/du)$ приведена на рис. 1 для $V/V_0 = 0,675$. Видно, что для первой группы веществ, в которую, например, входят элементы Li, Na, K, Be, Ti, Mg, Mo, W и др., $\alpha = 8,7 \pm 0,3$, а для второй группы веществ (H_2 , He, Ar, C, Fe, Cu, Au и др., а также химические соединения) $\alpha = 13,2 \pm 1,4$. Следует отметить, что в [7] для жидкого водорода $\alpha = 11,1$, а в [8] $\alpha = 13$ для простых молекул и ряда атомов.

Ударные адиабаты Ta и Cu, определенные по (5) с помощью (2), показаны на рис. 2. Коэффициенты подобия A ударных адиабат подобраны из условия наилучшего описания экспериментальных данных, но с удовлетворительной точностью могут быть рассчитаны из обобщенных соотношений, приведенных в [4]. Ударные адиабаты, найденные из (1), в масштабах рисунка мало отличаются от рассчитанных из (5) и поэтому показаны той же линией. Видно, что совпадение с экспериментальными данными, показанными точками, хорошее, за исключением низких давлений, где существенна динамическая прочность Ta и Cu.

Из сказанного следует, что при условиях, достигаемых за фронтом ударной волны, в установках высокого давления необходимо учитывать два основных существенно различных типа потенциалов межмолекулярного взаимодействия. Из рис. 2 видно, что два типа ударных адиабат невозможно совместить, равномерно растягивая вдоль осей координат, не меняя величины α . Эти межмолекулярные потенциалы при не очень высоких плотностях с точностью, достаточной для описания экспериментальных данных, можно записать в виде (3) или, точнее, в виде (4) и (5).

Автор признателен В. М. Титову за внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. Г. Каплан, О. Б. Родимова. УФН, 1978, 126, 4, 403.
2. Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина. — В кн.: Тр. III Всес. семинара по моделям механики сплошной среды. Новосибирск, 1976.
3. В. Ю. Клименко, А. Н. Дремин. — В кн.: Детонация. Черноголовка, 1980.
4. В. Ф. Анисичкин. ФГВ, 1979, 15, 2, 152.
5. Compendium of Shock Wave Data. UCRL-50108. General Editor: M. van Thiel. University of California, Livermore, California, 1977.
6. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
7. W. J. Nellis, M. Ross e. a. Phys. Review A, Rapid Communications, 1982.
8. M. Ross, F. H. Ree. J. Chem. Phys., 1980, 73, 6146.