

## ЛИТЕРАТУРА

1. Fowles G. R. Shock wave compression of hardened and annealed 2024 aluminum.— «J. Appl. Phys.», 1961, vol. 32, N 8.
2. Cm-Hung Mok. Effects of solid strength on the propagation and attenuation of spherical and plane shock waves.— «J. Appl. Phys.», 1968, vol. 36, N 4.
3. Коротких Ю. Г., Николаев О. П. Численное исследование динамических свойств материалов.— В кн.: Методы решения задач упругости и пластичности. Вып. 4. Горький, 1971.
4. Уилкинс М. Л. Расчет упругопластических течений.— В кн.: Вычислительные методы в гидродинамике. М., «Мир», 1967.
5. Богомолов Л. А., Гринднева В. А., Хорев И. Е. О высокоскоростном соударении твердых тел с одинаковыми физическими параметрами.— ПМТФ, 1974, № 3.
6. Симонов И. В. Удар пластинки по упругопластическому полупространству, численное исследование.— «Изв. АН СССР. МТТ», 1974, № 2.
7. Симонов И. В., Чекин Б. С. Высокоскоростное соударение железных пластин.— ФГВ, 1975, № 2.
8. Gilman J. J. Dislocation dynamics and the response of materials to impact.— «Appl. Mech. Rev.», 1968, vol. 21, N 8. Рус. пер.— сб. Механика, 1970, N 2.
9. Kuritama S., Kawata K. Propagation of stress wave with plastic deformation on metal obeying the constitutive equation of the Johnston — Gilman type.— «J. Appl. Phys.», 1973, vol. 44, N 8.
10. Нигматуллин Р. И., Холин Н. Н. К модели упругопластической среды с дислокационной кинетикой пластического деформирования.— «Изв. АН СССР. МТТ», 1974, № 4.
11. Гулидов А. И., Фомин В. М., Яненко Н. Н. Структура волн сжатия в неупругих средах.— «Изв. АН СССР. МТТ», 1975, № 5.
12. Dugdale J. S., Mc Donald D. The thermal expansion of solids.— «Phys. Rev.», 1953, vol. 89, N 4.
13. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., «Наука», 1966.
14. Альтшулер Л. В., Корнер С. Б., Баканова А. А., Трунин Р. Ф. Уравнения состояния алюминия, меди и свинца для областей высоких давлений.— ЖЭТФ, 1960, т. 38, № 3.
15. Флитман Л. М. Удар пластинки по упругопластическому полупространству.— «Изв. АН СССР. МТТ», 1974, № 2.
16. Surran D. R. Nonhydrodynamic attenuation of shock waves in aluminum.— «J. Appl. Phys.», 1963, vol. 34, N 9.
17. Erkman J. O., Christensen A. V. Attenuation of shock waves in aluminum.— «J. Appl. Phys.», 1967, vol. 38, N 13.
18. Новиков С. А., Синицына Л. М. О влиянии давления ударного сжатия на величину критического напряжения сдвига в металлах.— ПМТФ, 1970, № 6.

УДК 539.21

## К РАСЧЕТУ КОЭФФИЦИЕНТА ГРЮНАЙЗЕНА

В. В. Поляков, Е. А. Щеголев

(Барнаул, Томск)

Анализ и интерпретация экспериментальных данных по статическому и ударному сжатию твердых тел и теоретическое описание их поведения под давлением существенным образом связаны с определением коэффициента Грюнайзена. Расчет коэффициента Грюнайзена по уравнениям состояния или ударным адиабатам обычно осуществляется на основе модельных представлений о силах связи в рассматриваемом веществе [1, 2]. В то же время для исследования материалов со сложной внутренней структурой, в том числе сплавов, композиционных материалов, горных пород, желательнее определение коэффициента Грюнайзена, свободное от конкретных предположений о силах связи. В данной работе проведен расчет коэффициента Грюнайзена по данным статического и ударного сжатия, непосредственно не использующий конкретные физические модели.

При получении выражения для коэффициента Грюнайзена использовались формулы, связывающие первые, вторые и третьи производные от ударных адиабат  $p_H(V)$  и изэнтроп  $p_S(V)$  в равновесной точке  $V_0$  [3, 4]:

$$(1) \quad p'_H(V_0) = p'_S(V_0), \quad p''_H(V_0) = p''_S(V_0);$$

$$(2) \quad p'''_H(V_0) + \frac{\gamma_0}{2V_0} p''_H(V_0) = p'''_S(V_0),$$

где  $\gamma_0$  — коэффициент Грюнайзена свободного материала.

Расчет величин  $\gamma_0$  проводился на основе выражения, следующего из уравнений (1), (2):

$$(3) \quad \gamma_0 = 2V_0 \left( \frac{p'''_S(V_0)}{p''_S(V_0)} - \frac{p'''_H(V_0)}{p''_H(V_0)} \right).$$

В выражении (3) ударные адиабаты  $p_H(V)$  представлялись формулой

$$(4) \quad p_H(V) = \frac{C^2(V_0 - V)}{[V_0 - \lambda(V_0 - V)]^2},$$

отвечающей линейной зависимости скорости ударной волны  $D$  от массовой скорости  $U$

$$(5) \quad D = C + \lambda U.$$

Для изэнтропы  $p_S(V)$  использовались выражения

$$(6) \quad p_S(V) = \frac{2E_0\alpha}{3V_0^2} \left( \frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \left[ \exp 2\alpha \left( 1 - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{1/3} \right) - \exp \left( 1 - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{1/3} \right) \alpha \right];$$

$$(7) \quad p_S(V) = \frac{E_0 n(n-1)}{V_0} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{n+1} - \left( \frac{V_0}{V} \right)^n \right],$$

соответствующие формуле Морзе (уравнение (6)) и модифицированной формуле Леннарда—Джонса (уравнение (7));  $E_0$  и  $V_0$  — внутренняя энергия и объем материала при нормальных условиях;  $\alpha$  и  $n$  — параметры, характеризующие силы связи в материале. Привлекая найденное с помощью уравнений (1), (6), (7) соотношение

$$\lambda = (\alpha + 2)/4 = (n + 1)/2,$$

получаем в случае уравнения (6)

$$(8a) \quad \gamma_0 = (25\alpha^2 + 36\alpha - 92)/(36\alpha + 72)$$

или

$$(8b) \quad \gamma_0 = (25\lambda^2 - 16\lambda + 4)/9\lambda;$$

в случае уравнения (7)

$$(9a) \quad \gamma_0 = (3/2)(n - 1)$$

или

$$(9b) \quad \gamma_0 = 3(\lambda - 1).$$

Используемый подход позволяет также рассчитать первую и следующие производные от равновесного коэффициента Грюнайзена по объему

Т а б л и ц а 1

Материал	$\alpha$	$n$	$\gamma_0$ по (8а)	$\gamma_0$ по (9а)	$\gamma_{0T}$
Li	2,34	1,67	0,83	1,01	0,89
Na	2,91	1,89	1,27	1,33	1,31
Al	3,48	2,20	1,70	1,81	2,14
K	2,84	1,96	1,47	1,44	1,34
Ti	3,49	2,21	1,71	1,82	1,28
V	3,53	2,24	1,74	1,87	1,38
Fe	3,91	2,40	2,02	2,10	1,70
Co	3,74	2,33	1,90	1,99	1,95
Ni	3,89	2,41	2,01	2,12	1,83
Cu	4,02	2,45	2,10	2,18	1,96
Zn	5,07	2,92	2,88	2,88	2,03
Rb	3,32	2,02	1,58	1,52	1,85
Y	3,10	2,03	1,41	1,54	1,00
Mo	4,28	2,57	2,30	2,36	1,61
Ag	4,56	2,70	2,50	2,35	2,43
Sn	3,82	2,36	1,96	2,04	2,22
La	2,53	1,77	0,98	1,15	0,66
Au	4,55	2,74	2,50	2,61	3,06
Pb	4,62	2,71	2,55	2,56	2,74
Th	3,01	1,99	1,34	1,48	1,34

Т а б л и ц а 2

Материал	$\lambda$	$\gamma_0$ по (8б)	$\gamma_0$ по (9б)	$\gamma_{0T}$
LiF	1,6	2,39	1,80	1,63
LiCl	1,5	2,09	1,50	1,81
LiBr	1,4	1,79	1,20	1,94
NaF	1,42	1,85	1,26	1,51
NaCl	1,37	1,70	1,11	1,62
NaBr	1,30	1,49	0,90	1,65
KCl	1,53	2,18	1,59	1,49
KBr	1,53	2,18	1,59	1,50
PbCl	1,50	2,09	1,50	1,39
FbBr	1,56	2,27	1,68	1,42

$\gamma_0'$ ,  $\gamma_0''$  и т. д., выражения для которых находятся из формул, связывающих производные высших порядков от  $p_H(V)$  и  $p_S(V)$  в точке  $V_0$  [4]. По величинам  $\gamma_0$ ,  $\gamma_0'$  и т. д. можно определить с необходимой точностью зависимость коэффициента Грюнайзена от объема с помощью разложения

$$\gamma(V) = \gamma_0 + \gamma_0'(V - V_0) + \frac{1}{2} \gamma_0''(V - V_0)^2 + \dots$$

По данным статического сжатия и формулам (8а), (9а) были рассчитаны коэффициенты Грюнайзена для 20 металлов. Использовавшиеся в расчете параметры  $\alpha$  и  $n$  определялись по экспериментальным изотермам статического сжатия, измеренным в [5—7] до давления 45 кбар. При обработке экспериментальных точек уравнениями (6), (7) величины  $E_0$  заменялись на соответствующие изотермическому сжатию свободные энергии недеформированного материала из [8], а значения  $\alpha$  и  $n$  на изэнтропе и изотерме принимались одинаковыми. О надежности проведенных аппроксимаций свидетельствует, в частности, совпадение с точностью до нескольких процентов вычисленных по формулам (6), (7) модулей объемного сжатия  $K_0$  с экспериментальными значениями из [9]. Допустимость использования в (6), (7) изотермических значений  $\alpha$  и  $n$  подтверждается близостью адабатических и изотермических производных от модулей объемного сжатия по давлению  $K_0'$  [10], связанных с параметрами  $\alpha$  и  $n$  соотношениями  $K_0' = 2n + 1$ ,  $K_0' = \alpha + 1$ .

Вычисленные параметры  $\alpha$  и  $n$  и найденные по ним коэффициенты Грюнайзена  $\gamma_0$  приведены в табл. 1. Там же представлены значения  $\gamma_{0T}$ , полученные по термодинамической формуле Грюнайзена [11]. Из табл. 1 видно, что величины  $\gamma_0$  и  $\gamma_{0T}$  для большинства металлов хорошо согласуются друг с другом. Одной из причин заметного расхождения для Ti, Zn, Y, Mo, по-видимому, является недостаточная точность линейной зависимости (5); следует ожидать, что учет квадратичного члена в  $D - U$  соотношении улучшит согласие с опытом [12].

Отметим, что использование при расчете коэффициентов Грюнайзена полиномиальных выражений из [5, 7] вместо выражений (6), (7) приводит к отрицательным значениям  $\gamma_0$ . Это обстоятельство связано с недоста-

точной точностью трехчленного полинома, проявляющейся при расчете третьей производной от давления.

Данные по ударному сжатию и формулы (86), (96) были использованы при расчете коэффициентов Грюнайзена для 10 ионных кристаллов. В качестве параметров  $\lambda$  в случае соединений лития и натрия брались экспериментальные величины из [1] (для NaF из [13]); в случае соединений калия и рубидия, испытывающих при низких давлениях фазовый переход от решетки В1 к решетке В2, применялись рассчитанные в [2, 13] теоретические величины для фазы В1. Параметры  $\lambda$  из [1, 2, 13, 14] и вычисленные по ним значения  $\gamma_0$ , а также  $\gamma_{от}$  по [2, 14] представлены в табл. 2. Как видно из табл. 2, между величинами  $\gamma_0$  и термодинамическими значениями  $\gamma_{от}$  наблюдается хорошая корреляция.

Проведенное сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными подтверждает надежность использованного подхода и перспективность его применения к материалам со сложной структурой.

*Поступила 30X 1978*

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах.— М., «Наука», 1968.
2. Жданов В. А., Поляков В. В. Ударные адибаты щелочно-галлоидных кристаллов.— ПМТФ, 1976, № 5.
3. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., «Наука», 1966.
4. Huang I. K. Shock-wave behaviour and properties of solids.— «J. Appl. Phys.», 1971, vol. 42, N 8.
5. Vaidya S. N., Kennedy G. C. Compressibility of 18 metals to 45 kbar.— «J. Phys. Chem. Solids», 1970, vol. 31, N 10.
6. Vaidya S. N., Getting I. C., Kennedy G. C. The compression of the alkali metals to 45 kbar.— «J. Phys. Chem. Solids», 1971, vol. 32, N 11.
7. Vaidya S. N., Kennedy G. C. Compressibility of 22 elemental solids to 45 kbar.— «J. Phys. Chem. Solids», 1972, vol. 33, N 7.
8. Киреев В. А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций. М., «Химия», 1975.
9. Gschneidner K. A., Jr. Physical properties and interrelationships of metallic and semi-metallic elements.— «Solid State Physics», 1964, vol. 16, p. 276.
10. Anderson O. L. The use ultrasonic measurements under modest pressure.— «J. Phys. Chem. Solids», 1966, vol. 27, N 3.
11. Радюнов К. П. Параметр Грюнайзена твердого тела.— «Физ. мет. и металлов.», 1967, т. 23, вып. 6.
12. Pastine D. I., Piacesi D. The existence and implications of curvature in the relation between shock and particle velocities for metals.— «J. Phys. Chem. Solids», 1966, vol. 27, p. 1783.
13. Carter W. J. Hugoniot equations of state of some alkali halides.— «High Temp.— High Pressur.», 1973, vol. 5, N 3.
14. Жданов В. А., Поляков В. В. Ударные адибаты ионных кристаллов.— ФТТ, 1975, т. 17, вып. 11.