

## К ОПРЕДЕЛЕНИЮ НАКЛОНА ЛИНИИ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ ЛАГРАНЖЕВЫМИ ДАТЧИКАМИ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ

А. М. Молодец

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

Предложена новая идея экспериментальной методики, позволяющей определять производную давления по температуре в точке пересечения ударной адиабаты и линии равновесия двух фаз в координатах давление — температура. Дана оценка измеряемых величин на конкретном примере полиморфного превращения белого олова в ударных волнах.

### ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что ударно-волновое нагружение конденсированных сред позволяет достигать труднодоступные участки фазовых диаграмм вещества, находящиеся в области высоких температур и давлений. При этом в некоторой окрестности пересечения ударной адиабаты с линией фазового равновесия в координатах давление — температура эти две кривые совпадают. На этом явлении основаны экспериментальные методики выявления участков линий равновесия по данным двух серий ударно-волновых экспериментов — по измерению давления и измерению температуры в ударно-сжатом веществе [1].

В то же время очевидно, что для определения линии фазового равновесия в ударно-волновых условиях весьма эффективным приемом является одновременное использование лагранжевых датчиков давления и температуры (здесь термин «лагранжев датчик» применяется к датчикам, измеряющим параметры частицы вещества в течение времени прохождения через нее ударной волны).

В настоящее время существует хорошо отлаженная лагранжева методика измерения давления в ударной волне — методика манганинового датчика [2, 3]. В литературе известны также немногочисленные работы, в которых измерение температуры ударного сжатия осуществлялось с помощью лагранжевых датчиков температуры, использующих эффекты термосопротивления и термоэлектричества [4–6].

Более распространенным приемом измерения в настоящее время являются методики, основанные на регистрации теплового излучения ударно-сжатого материала. При этом температура ударного сжатия измеряется в основ-

ном на фронте ударных волн, распространяющихся в прозрачных средах [1, 7–10].

Способы слежения за изменением температуры ударно-сжатой частицы вещества посредством регистрации излучения начали развиваться сравнительно недавно [11]. Лагранжевы датчики температуры ударного сжатия еще не достигли своего совершенства, но их возможности постоянно расширяются (см., например, [12]). По-видимому, с течением времени какой-либо точный лагранжев датчик температуры можно будет использовать в паре с лагранжевым датчиком давления для исследования участков линий фазового равновесия в труднодоступных участках фазовых диаграмм, находящихся в области высоких температур и давлений.

В данной статье излагается идея метода измерения наклона линии фазового равновесия по данным непрерывной регистрации (профилям) температуры и давления соответствующими лагранжевыми датчиками для случая обратимого фазового перехода  $\beta \rightarrow \gamma$ , идущего с уменьшением объема и поглощением теплоты в плоской одномерной ударной волне.

### ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДИКИ

Пусть внутри плоского образца из материала фазы  $\beta$  (рис. 1) в одной плоскости смонтированы лагранжевы датчики давления и температуры. По образцу наносится удар пластиной, который генерирует в образце ударную волну и последующую волну разгрузки. Если при сжатии материал образца испытывает фазовый переход в фазу  $\gamma$  с уменьшением объема и этот переход обратимый, то, как известно (см. [13]), при определенной амплитуде ударной

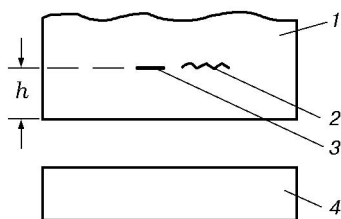


Рис. 1. Принципиальная схема эксперимента: 1 — образец, 2 — лагранжев датчик давления, 3 — гипотетический лагранжев датчик температуры (датчики 2 и 3 расположены на некотором расстоянии  $h$  от поверхности соударения), 4 — пластина-ударник

волны в образце формируется импульс сжатия, состоящий из двухволнового ударного фронта и волны разгрузки, включающей ударную волну разрежения.

Рассмотрим соответствующие изменения состояния частицы материала образца в цикле «ударно-волновое сжатие — разгрузка» в координатах давление ( $p$ ) — удельный объем ( $v$ ) (рис. 2, *a*), предполагая, что как прямой, так и обратный фазовые переходы происходят мгновенно. В этом случае за фронтом первой ударной волны достигается состояние 1, во второй ударной волне происходит фазовый переход  $\beta \rightarrow \gamma$  и вещество оказывается в состоянии 2. Из состояния 2 фаза  $\gamma$  разгружается в тыльной волне разрежения до тех пор, пока давление и температура не сравняются с давлением и температурой на линии фазового равновесия. Это произойдет в состоянии 3. Поскольку переход  $\gamma \rightarrow \beta$  сопровождается увеличением объема, это создает условия для формирования ударной волны разрежения, которая переводит материал из состояния 3 в состояние 4. В этой волне и происходит обратный переход фазы  $\gamma$  в фазу  $\beta$ . Наконец, из состояния 4 происходит разгрузка фазы  $\beta$  в изоэнтروпической волне разрежения до нулевого давления в состоянии 5. В соответствии с этим циклом лагранжев датчик давления зарегистрирует профиль давления, показанный на рис. 2, *б*.

Этот же цикл в координатах  $p$ - $T$  представлен на рис. 2, *в*. Здесь состояние 1 соответствует пересечению ударной адиабаты фазы  $\beta$  с линией равновесия  $\beta \leftrightarrow \gamma$ . Затем из состояния 1 происходит ударный скачок в состояние 2. Аналогично предыдущему из состояния 2 происходит изоэнтропическая разгрузка фазы  $\gamma$  до тех пор, пока изоэнтропа 2-3 не пересе-

чет линию фазового равновесия в точке 3. Затем из состояния 3 материал скачком в ударной волне разрежения 3-4 переходит в состояние 4. В этой волне происходит обратный переход  $\gamma \rightarrow \beta$ , и, наконец, в изоэнтропической волне разгрузки 4-5 материал остывает до некоторой остаточной температуры. В соответствии с этим циклом лагранжев датчик температуры зарегистрирует профиль температуры, показанный на рис. 2, *г*.

Таким образом, сопоставляя рис. 2, *б*, 2, *в* и 2, *г*, можно заключить, что если линию фазового равновесия  $\beta \leftrightarrow \gamma$  между точками 1 и 3 на рис. 2, *в* аппроксимировать прямой, то при использовании значений давлений  $p_1$ ,  $p_3$  и температур  $T_1$ ,  $T_3$  в характерных точках экспериментальных записей профилей давления (см. рис. 2, *б*) и температуры (см. рис. 2, *г*) соответственно наклон линии фазового равновесия составит величину  $\Delta p / \Delta T = (p_3 - p_1) / (T_3 - T_1)$  (см. рис. 2, *в*).

### КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ ПРИМЕР

Для того чтобы оценить порядок измеряемых величин, был проведен термодинамический расчет прямого перехода белого олова  $\text{Sn}_\beta$  при давлении  $p_1 = 7,8$  ГПа в фазу высокого давления  $\text{Sn}_\gamma$  в ударной волне амплитудой  $p_2 = 12$  ГПа, а также изоэнтропической разгрузки фазы  $\text{Sn}_\gamma$  из состояния 2 до пересечения с линией равновесия  $\text{Sn}_\beta \leftrightarrow \text{Sn}_\gamma$  при  $p_3 = 8,9$  ГПа. Именно результаты этого расчета в виде зависимости 1-2-3 и приведены на рис. 2, *a, в*. В данном примере  $p_3 - p_1 \approx 1,0$  ГПа, что составляет  $\approx 15\%$  от  $p_1$ , а  $T_3 - T_1 = -50$  К, что составляет  $\approx 13\%$  от  $T_1$ . В расчетах была использована линия равновесия  $\text{Sn}_\beta \leftrightarrow \text{Sn}_\gamma$ , построенная по экспериментальным точкам из работ [14-16]. Расчет осуществлялся в рамках подхода, изложенного в [17], согласно которому термодинамическое описание материала задается изохорно-изотермическим потенциалом

$$F(v, T) = E_x(v) + 3R(\theta/2 + T \ln[1 - \exp(-\theta/T)]) + E_m - a_s RT. \quad (1)$$

Здесь  $v$  — удельный объем;  $T$  — температура;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $a_s$  — подгоночный коэффициент;  $E_x$  — потенциальная энергия;  $E_m$  — константа, с помощью которой задается уровень отсчета  $E_x$ ;  $\theta$  — характеристическая температура; ключевые функции  $\theta$  и  $E_x(v)$  имеют вид

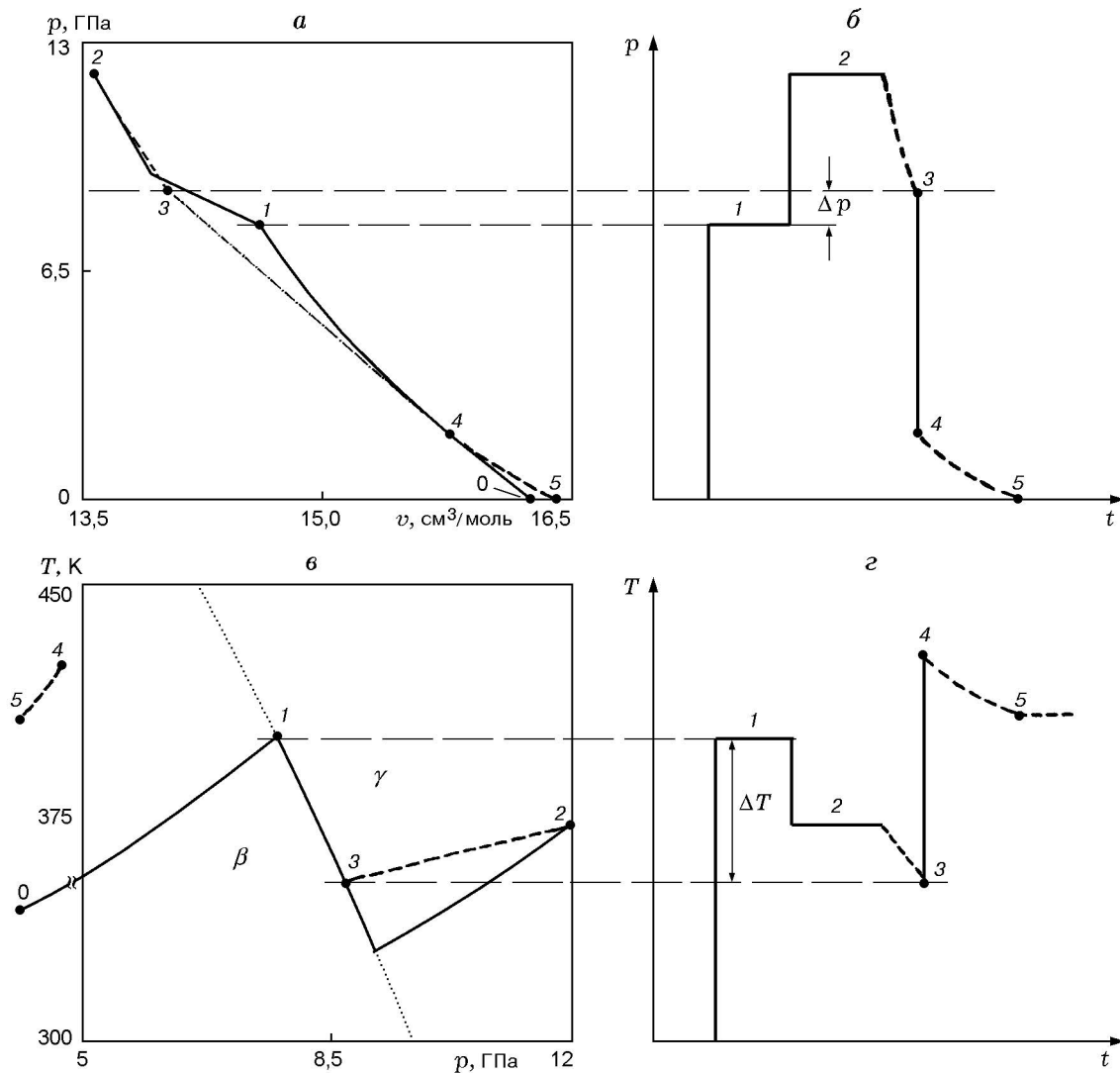


Рис. 2. Схема определения наклона линии фазового равновесия путем ударно-волновой диагностики состояния частицы материала, испытывающего обратимый фазовый переход, идущий при ударном сжатии с уменьшением объема и поглощением тепла:

*a:* линия 0-1-2 — расчетная ударная адиабата олова, 2-3 — расчетная изоэнтропа разгрузки фазы  $\text{Sn}_\gamma$ , 3-4 — прямая Михельсона для ударной волны разгрузки, 4-5 — изоэнтропа разгрузки фазы  $\text{Sn}_\beta$ ; *б:* — профиль давления на некотором расстоянии  $h$  от поверхности входа ударной волны; *в:* линия 0-1-2 — расчетная ударная адиабата олова, 2-3 — расчетная изоэнтропа разгрузки фазы  $\text{Sn}_\gamma$ , пунктирная линия — линия равновесия  $\text{Sn}_\beta \leftrightarrow \text{Sn}_\gamma$ , 4-5 — изоэнтропа разгрузки (состояния 4 и 5 не рассчитывались, поэтому линии 3-4 и 4-5 и на рис. 2, *a, в* играют иллюстративную роль); *г:* — профиль температуры на расстоянии  $h$  от поверхности входа ударной волны

Таблица 1

Тепловые параметры модели [17] для белого олова Sn<sub>β</sub> и фазы высокого давления Sn<sub>γ</sub>

Фаза	T <sub>0</sub> , К	p <sub>0</sub> , ГПа	1/v <sub>0</sub> , г/см <sup>3</sup>	a <sub>0</sub>	q <sub>0</sub> , 10 <sup>-6</sup> /К	θ <sub>0</sub> , К	a <sub>s</sub>
Sn <sub>β</sub>	298	1,02 · 10 <sup>-4</sup>	7,281	2,41724	48,6347	103,50	0
Sn <sub>γ</sub>	296	9,70	8,5464	3,32087	16,2207	103,641	0

Примечание. Данные таблицы получены только с использованием справочной литературы и достаточны, чтобы рассчитать объемно-температурную зависимость коэффициента Грюннайзена или характеристической температуры по соответствующим формулам из [17].

Таблица 2

Потенциальные параметры модели [17] для белого олова Sn<sub>β</sub> и фазы высокого давления Sn<sub>γ</sub>

Фаза	a <sub>x</sub>	C <sub>1</sub> , ГПа	C <sub>2</sub> , ГПа	C <sub>3</sub> , кДж/г	E <sub>m</sub> , кДж/моль	1/v <sub>0x</sub> , г/см <sup>3</sup>
Sn <sub>β</sub>	2,05	-220,89149	4592,57714	-648,96783	2,08	7,41216
Sn <sub>γ</sub>	2,23	-281,90358	5864,37156	-767,12528	7,50	7,58033

Примечание. Данные таблицы достаточны для расчета объемной зависимости потенциальной энергии E<sub>x</sub>(v) (или потенциального давления p<sub>x</sub>(v)) по соответствующим формулам из [17]. В последнем столбце приведена величина v<sub>0x</sub>, представляющая собой удельный объем вещества в точке минимума потенциальной энергии E<sub>x</sub>(v), где E<sub>x</sub>(v<sub>0x</sub>) = E<sub>m</sub>.

$$\theta = \theta(v, T) = \theta_0((a - v/v_0)/(a - 1))^2(v_0/v)^{2/3},$$

где  $a = a_0(1 + q_0(T - \theta_0/4))$ ,  $a_0 = 1 + 2(\gamma_s - 2/3) = \text{const}$ ,  $q_0 = 6\beta Rn/a_0c_p = \text{const}$ ,  $\gamma_s = \beta K_s v_0/c_v = \text{const}$ ,  $\beta$  — объемный коэффициент теплового расширения,  $K_s$  — адиабатический модуль объемного сжатия,  $c_v$ ,  $c_p$  — теплоемкость при постоянном объеме и давлении,  $n$  — количество атомов в молекуле,  $\theta_0$  — характеристическая температура Эйнштейна;

$$E_x(v) = -a_x v_0 [C_1 [9(x^{-2/3}/10 + 2x^{1/3} +$$

$$+ 3x^{4/3}/2 - x^{7/3}/7 + x^{10/3}/70)] + C_2 x) + C_3,$$

где  $x = v/a_x v_0$ ,  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  — индивидуальные константы материала,  $a_x$  — подгоночный коэффициент, входящий в эти константы. Расчеты выполнялись при  $T \geq \theta_0/2$ ;  $v \leq v_0$ . Значения параметров изохорно-изотермических потенциалов Sn<sub>β</sub> и Sn<sub>γ</sub>, необходимых для расчетов по формуле (1), определены совместно с С. С. Набатовым и представлены в табл. 1, 2.

### ЛИТЕРАТУРА

1. 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 давлений 700 кбар // ЖЭТФ. 1965. Т. 48, вып. 48. С. 1033–1048.
2. Fuller P. J. A., Price J. H. Dynamic pressure measurements to 300 kilobars with a resistance transducer // Brit. J. Appl. Phys. 1964. V. 15. P. 751–758.
3. Канель Г. И. Применение манганиновых датчиков для измерения давлений ударного сжатия конденсированных сред // Обзор ВИНТИ. Отд. науч. фондов. Деп. 28.11.1974, № 477-74.
4. Дремин А. Н., Иванов В. П., Михайлов А. Н. Исследование возможности применения термосопротивления для измерения температуры ударно-сжатых твердых тел // Физика горения и взрыва, 1973. Т. 9, № 6. С. 893–898.
5. Bloomquist D. D., Duval G. E., Dick J. J. Electrical response of a bimetallic junction to shock compression // J. Appl. Phys. 1977. V. 50. P. 4838–4846.
6. Rosenberg Z., Partom Y. Direct measurement of temperature in shock loaded polymethylmethacrylate with very thin copper thermistors // Shock Wave in Condensed Matter, 1983 / J. R. Asay et al. (Eds). Amsterdam: Elsevier, 1983. P. 251–255.
7. Кормер С. Б. Оптические исследования ударно сжатых диэлектриков // Успехи физ. наук. 1968. Т. 94, № 4. С. 641–687.
8. Воскобойников И. М., Богомолов В. М., Афанасенков А. Н., Шевелев В. Н. Определение температур органических веществ в ударных волнах // Докл. АН СССР. 1968. Т. 182, № 4. С. 807–810.
9. Лизенга Г. А., Аренс Т. Д. Многоволновый оптический пирометр для экспериментов

- по ударному сжатию // Приборы для науч. исслед. 1979. № 11. С. 101–105.
10. **Фортов В. Е., Терновой В. Я., Квитов С. В. и др.** Электропроводность неидеальной плазмы водорода в мегабарном диапазоне динамических давлений // Письма в ЖЭТФ. 1999. Т. 69, вып. 12. С. 874–880.
  11. **Bass J. D., Svendsen B., Ahrens T. J.** The temperatures of shock-compressed iron // High Pressure Research in Mineral Physics / M. Manghani, Y. Syono. (Eds). Tokyo, 1987. P. 393–402.
  12. **Blanco E., Mexmain J. M., Chapron P.** Temperature measurement of shock heated materials using multispectral pyrometry: Application to Bismuth // Shock Waves. 1999. V. 9, issue 3. P. 209–214.
  13. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
  14. **Decker D. L., Jorgensen J. D., Young R. W.** Press calibration at elevated temperatures // High Temperatures-High Pressures. 1975. V. 7. P. 331–340.
  15. **Kington A. I., Clark J.** A determination of the melting curve of tin to 3.7 GPa // High Temperatures-High Pressures. 1980. V. 12. P. 75–79.
  16. **Liu M., Liu L.** Compressions and phase transitions of tin to half a megabar // High Temperatures-High Pressures. 1986. V. 18. P. 79–85.
  17. **Молодец А. М., Молодец М. А., Набатов С. С.** Изохорно-изотермический потенциал жидкого алмаза // Физика горения и взрыва. 1999. Т. 35, № 2. С. 81–87.

*Поступила в редакцию 24/XII 1999 г.,  
в окончательном варианте — 21/III 2000 г.*

---