

## МОДЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ВЯЗКОСТИ ПРОДУКТОВ ВЗРЫВА КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

В. П. Копышев, А. Б. Медведев, В. В. Хрусталеv

РФЯЦ, ВНИИ экспериментальной физики, 607190 Саров, root@gdd.vniief.ru

Предложена модель вязкости для смесевых жидкостей и плотных газов, подчиняющихся модифицированному уравнению состояния Ван-дер-Ваальса. Приведены оценки вязкости продуктов взрыва гексогена, тэна и нитрометана в состояниях, реализующихся в детонационных процессах.

Ключевые слова: вязкость, уравнение состояния, продукты взрыва.

### ВВЕДЕНИЕ

Для решения некоторых задач необходимо знание сдвиговой вязкости (далее просто вязкость) как простых, так и смесевых жидкостей и плотных газов при высоких давлениях и температурах. В экспериментах надежно исследовано поведение вязкости в относительно ограниченной области состояний — до давлений  $p \approx 0,1$  ГПа и температур  $T \approx 1000$  К. Лишь для некоторых веществ измерения проведены при несколько больших давлениях и комнатной температуре. В то же время в ряде случаев требуется знание вязкости в более широкой области параметров. В частности, значительный интерес представляет вязкость продуктов взрыва (ПВ) конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) в области детонационных состояний —  $p \approx 10 \div 40$  ГПа,  $T \approx 2000 \div 4000$  К. В этих условиях экспериментальные данные по вязкости как отдельных компонентов ПВ, так и ПВ в целом малочисленны и противоречивы. Так, вязкость ударно-сжатой воды по данным различных авторов отличается на шесть порядков — от  $10^{-3}$  до  $10^3$  Па·с при  $p \approx 10$  ГПа [1]. В связи с большой неопределенностью вязкости при высоких значениях  $p$ ,  $T$  оценка ее даже по порядку величины и представление об основных тенденциях поведения весьма существенны.

При модельном описании вязкости жидкостей обычно используют два основных подхода (с теми или иными отличительными особенностями). Первый [2], активационный, исходит из близости свойств жидкости и твер-

дого тела. При надлежащем выборе свободных параметров данная модель воспроизводит зависимость вязкости от температуры при низких давлениях. Но прогнозирующие возможности этого подхода в области высоких давлений (из-за неопределенности модельных параметров-функций) невелики; газообразная область состояний не описывается. Второй, кинетически-столкновительный метод, основывающийся на модели Энского для твердых сфер [3], исходит из предположения о возможности воспроизведения свойств жидкости на основе газовых представлений с учетом конечности «размеров» частиц, что приводит к увеличению частоты столкновений и скорости передачи импульса между частицами по сравнению со случаем низкоплотного газа (через частицу импульс передается мгновенно). Этот же механизм отражен и в первом уравнении вязкости реальной жидкости Бачинского [4], один из определяющих параметров которого имеет величину порядка собственного объема (ковольма) молекулы, входящего в уравнение состояния Ван-дер-Ваальса (ВдВ). При применении модели Энского для плотных сжимаемых жидкостей ее модифицируют, полагая диаметр шарика зависящим от термодинамических параметров. Модифицированная модель [5], используемая для определения диаметра данные о сжимаемости конденсата, единым образом удовлетворительно воспроизводит вязкость индивидуальных веществ как в газообразном, так и в жидком состоянии в исследованном диапазоне давлений. Единство описания имеющихся экспериментальных данных значительно повышает доверие к этой модели и в той области давлений, где данные о вязкости отсутствуют, но сжимаемость известна. Однако, на-

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (номер проекта 02-02-16334).

сколько известно авторам, данный подход, не получил развития для смесевых плотных веществ, в частности ПВ.

В [6] предложена менее строгая, но более простая по сравнению с моделью сжимаемых шариков кинетически-столкновительная модель коэффициентов переноса, в том числе вязкости, для простых жидкостей (рассматривались жидкие металлы). В основе модели вязкости [6] лежит модифицированная модель уравнения состояния ВдВ [7]. Модификация расширяет применимость модели ВдВ в область высоких плотностей, достигаемых, в частности, ударным сжатием жидкостей. Модифицированная модель для простых жидкостей [7] была обобщена на случай смесей [8, 9] и использовалась для описания термодинамических свойств ряда веществ, в том числе ПВ [9]. Для ВВ с относительно небольшим количеством конденсированного углерода в ПВ получено удовлетворительное согласие расчетов с экспериментальными данными. В настоящей работе приведено обобщение модели вязкости [6] для смесей. Для ясности модель излагается сначала для простой жидкости, а затем для смеси.

## 1. МОДЕЛЬ ВЯЗКОСТИ ДЛЯ ПРОСТОЙ ЖИДКОСТИ

Термическое  $p$ - $V$ - $T$ -уравнение состояния ВдВ для простой жидкости имеет вид

$$p = \frac{N_0 k T}{V - V_c} + p_{\text{пр}}(V), \quad (1)$$

где  $N_0 = \text{const}$  — число частиц в объеме  $V$ ;  $k$  — постоянная Больцмана;  $V_c = \text{const}$  — коволюм, представляющий собой «собственный» объем частиц, отражающий конечность их «размеров»;  $p_{\text{пр}}(V) = -a/V^2$  ( $a = \text{const}$ ) — составляющая давления, обусловленная силами притяжения. Первое слагаемое в (1)

$$p_{\text{T}} = \frac{N_0 k T}{V - V_c} \quad (2)$$

связано с тепловым движением частиц. Оно отличается от выражения для кинетического давления идеального газа ( $p_{\text{T}} = p = N_0 k T / V$ ), поскольку в силу конечности размеров частиц (отражаемых коволюмом) импульс теплового движения частицы  $m\vec{v}$  ( $v \sim (kT/m)^{1/2}$ , где  $m$  — масса частицы) в модели ВдВ при столкновениях передается на большее расстояние,

чем в идеальном газе. В уравнении (1)  $V_c = \text{const}$ , вследствие чего оно неприменимо при высоких плотностях. В модифицированной модели ВдВ [7] предполагается, что причиной сжатия частиц, уменьшающей их эффективный размер, является кинетическое давление  $p_{\text{T}}$ , т. е. в выражении (2)

$$V_c = V_c(p_{\text{T}}). \quad (3)$$

Соотношения (1)–(3) определяют термическое уравнение состояния модифицированной модели в параметрической форме (в переменных  $p_{\text{T}}$ ,  $T$ ). Эмпирические функции  $p_{\text{пр}}(V)$  и  $V_c(p_{\text{T}})$  предполагаются заданными. Их выбирают по возможности простыми, но вместе с тем они должны описывать экспериментальные характеристики жидкости и плотного газа. Если вместо зависимости  $V_c(p_{\text{T}})$  использовать обратную для нее функцию  $p_{\text{T}}(V_c)$ , то в переменных  $T$ ,  $V_c$  соотношения (1)–(3) переписываются в виде

$$p = p_{\text{T}}(V_c) + p_{\text{пр}}(V), \quad (4)$$

$$V = V_c + \frac{N_0 k T}{p_{\text{T}}(V_c)}. \quad (5)$$

Из (5) при  $T = 0$  следует, что  $V = V_c$ , и в этом случае (4) представляет собой уравнение для давления на «холодной» кривой:

$$p_{\text{x}}(V) = p_{\text{T}}(V) + p_{\text{пр}}(V). \quad (6)$$

Модель (1)–(3) позволяет описывать испарение. При  $V \gg V_c$  реализуется переход к уравнению состояния идеального газа.

При модельном определении вязкости [6] используется способ, обычно применяемый при ее качественном рассмотрении для разреженных газов, но с учетом особенностей, вносимых коволюмом. Пусть частицы теряют свой характерный тепловой импульс  $m\vec{v}$  при столкновениях с другими частицами за некоторое среднее время  $\tau$ . За это время центр массы частицы пролетит расстояние  $l \sim v\tau$  (в простой жидкости величина  $l$  порядка длины свободного пробега). В случае, когда среда является плотной и размеры частиц существенны (сравнимы с  $l$ ), импульс  $m\vec{v}$  за время  $\tau$  передается веществу среды на большее по сравнению с  $l$  расстояние  $L$ . Разница между  $L$  и  $l$  порядка эффективного «размера» частицы  $(V_c/N_0)^{1/3}$  (аналог диаметра шарика в модели твердых сфер, на величину

которого импульс передается мгновенно). В [6] полагалось

$$L = l + b \left( \frac{V_c}{N_0} \right)^{1/3}, \quad (7)$$

где для простоты считалось, что  $b = \text{const}$ .

Если в веществе выбрать покоящуюся относительно него произвольно ориентированную площадку  $\sigma$  единичной площади, например, перпендикулярную оси  $X$  прямоугольной системы координат, то среднее число частиц  $N_v$ , «участвующих» в передаче импульса  $m\vec{v}$  через эту площадку в единицу времени, составит

$$N_v \sim \frac{N_0}{V} \frac{L}{\tau} \sim \frac{N_0 v L}{V l} \quad (8)$$

(здесь и ниже знак  $\sim$  выражает пропорциональность). Полный поток импульса по нормали к площадке  $\sigma$

$$p_{XX} \sim m v N_v \sim \frac{N_0 m v^2 L}{V l}. \quad (9)$$

При наличии в веществе градиента массовой скорости  $dU/dX$  имеется не только нормальная, но и ненулевая касательная составляющая потока импульса через площадку  $\sigma$  (для определенности — вдоль оси  $Y$ ), с которой связана вязкость  $\eta$ . Переносчиками касательной составляющей импульса являются движущиеся вдоль оси  $X$  к площадке  $\sigma$  частицы, которые в результате столкновений теряют часть  $Y$ -составляющей импульса, отличной от  $Y$ -составляющей в слое  $\sigma$ . В столкновениях летящие к  $\sigma$  частицы теряют совместно  $X$ - и  $Y$ -компоненты своего импульса. У частиц конечного размера, теряемая при столкновениях часть  $Y$ -компоненты импульса, как и  $X$ -компоненты, также передается вдоль направления  $X$  на дополнительное расстояние  $\sim (V_c/N_0)^{1/3}$ . Предполагается, что  $|dU/dX| \ll v/l$ . В этом случае полный процесс передачи импульса частицы, в том числе потеря макроскопической  $Y$ -составляющей, определяется теми же параметрами  $\tau$ ,  $L$  и  $l$  (9), что и при движении вдоль оси  $X$  по нормали к  $\sigma$ . Тогда передаваемый частицей площадке  $\sigma$  касательный импульс  $p_Y$ , определяемый разностью скоростей  $U(X)$  на расстоянии потери полного импульса  $L$  за время  $\tau$ , запишется в виде

$$p_Y \sim m \frac{dU}{dX} L. \quad (10)$$

С учетом (7) импульс  $p_Y$  состоит из двух слагаемых —  $m \frac{dU}{dX} l$  и  $m \frac{dU}{dX} b \left( \frac{V_c}{N_0} \right)^{1/3}$ . Первое из них является чисто газовым и определяется «сносом»  $Y$ -компоненты импульса при свободном перемещении частицы на расстояние  $l$  в направлении  $X$ . Второе слагаемое отражает передачу импульса через частицу. Число частиц, передающих импульс  $p_Y$  в единицу времени, определяется, как и ранее, выражением (8). Если, как в подходе Энского (когда он применяется к реальным газам) [3] и в подходе для ВдВ-жидкости [10], пренебречь влиянием сил притяжения, с учетом (8) и (10) полный поток импульса через площадку  $\sigma$  в направлении  $Y$  составит

$$p_{XY} \sim p_Y N_v \sim \frac{m N_0 v L^2}{V l} \frac{dU}{dX}. \quad (11)$$

Поток  $p_{XY}$  определяет касательную силу, действующую на  $\sigma$ , равную  $-\eta(dU/dX)$ . В результате

$$\eta \sim \frac{m N_0 v L^2}{V l}. \quad (12)$$

С привлечением (7) параметр  $L$  определяется из следующих соображений. Кинетическое давление  $p_T$  (2) является нормальным к площадке  $\sigma$  потоком теплового импульса и пропорционально правой части (9). Сопоставление (2) и (9) с учетом соотношения  $m v^2 \sim kT$  дает выражение  $L/l \sim V/(V - V_c)$ . В нем, поскольку в пределе газа низкой плотности ( $V \gg V_c$ ) величины  $L$  и  $l$  совпадают (конечность размеров частиц несущественна), знак пропорциональности следует заменить знаком равенства, т. е.

$$\frac{L}{l} = \frac{V}{V - V_c}. \quad (13)$$

Данное соотношение в пределе плотной упаковки частиц ( $V \rightarrow V_c$ ) приводит к  $l \rightarrow 0$ , что представляется разумным. Из выражений (7) и (13) следует

$$L = b \frac{V/N_0}{(V_c/N_0)^{2/3}}. \quad (14)$$

Подстановка (13), (14) в (12) приводит к следующему модельному соотношению для вязкости простой жидкости:

$$\eta = \eta_0 \frac{(MT)^{1/2}}{(V_c/N_0)^{2/3}} \left( \frac{V}{V - V_c} \right), \quad (15)$$

где  $M$  — атомная масса вещества,  $\eta_0 = \text{const}$ . Вообще говоря,  $\eta_0$  можно считать эмпирическим параметром, но мы оценим его значение следующим образом. В теории вязкости для газа низкой плотности, состоящего из твердых шариков диаметром  $d$ ,

$$\eta = \eta_1 (MT)^{1/2} / d^2, \quad (16)$$

где  $\eta_1 = \text{const}$  — точно рассчитываемый параметр [3]. Если размерность  $\eta$  — Па·с,  $T$  — К, а  $d$  — Å, то  $\eta_1 = 2,67 \cdot 10^{-6}$ . В модели ВдВ при  $V \gg V_c$  коволюм в расчете на одну частицу равен учетверенному объему шарика (второму вириальному коэффициенту):

$$\frac{V_c}{N_0} = \frac{2\pi}{3} d^3. \quad (17)$$

Из условия равенства при  $V \gg V_c$  выражений (15) (с учетом (17)) и (16) находится значение  $\eta_0 = (2\pi/3)^{2/3} \eta_1$ . В модифицированной модели ВдВ все расчеты вязкости проводились при этом значении  $\eta_0$ .

Так же, как и уравнение состояния (1)–(3), модельная вязкость (15) имеет параметрическую (в переменных  $p_T, T$ ) форму представления. Знание уравнения состояния (его отдельных составляющих) определяет и вязкость.

Если  $V_c = \text{const}$ , то соотношения (1)–(3) переходят в уравнение ВдВ, а формула (15) — в выражение для вязкости, получающееся на его основе [10].

Отметим, что рассматриваемую модель можно сформулировать, приняв за основное предположение равенство (13) (используя при этом газовые представления о характере теплового движения частиц и учитывая притяжение  $p_{пр}$  в уравнении состояния при высоких плотностях). Тогда из (9) следует выражение для  $p_T$  в уравнении (2), а из (7) и (11) — выражение для вязкости (15).

На основе модели (1)–(3) построены уравнения состояния ряда молекулярных плотных газов ( $O_2, H_2, N_2, H_2O, CO_2, NH_3$  и др.), потенциально входящих в состав ПВ, и с помощью (15) в качестве теста рассчитана их вязкость. Для примера на рис. 1 приведены результаты описания экспериментальных данных по изотермическому сжатию газообразного и жидкого кислорода  $O_2$ . В расчетах до давлений  $p_T \approx 50$  ГПа выражение (3) применялось в следующей простой форме:

$$V_c = V_0 \left( 1 - \frac{1}{\alpha} \ln \frac{p_T}{A} \right), \quad (18)$$

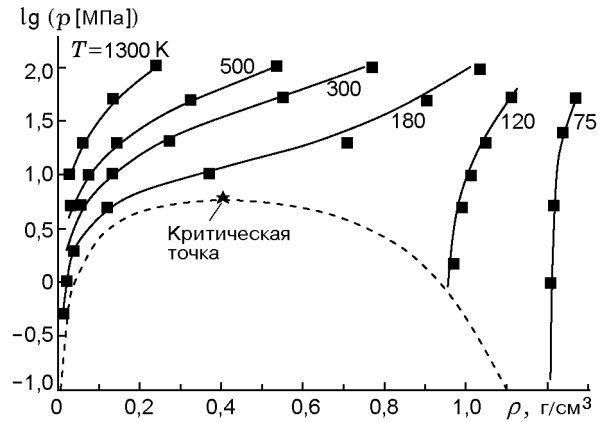


Рис. 1. Зависимость давления от плотности кислорода при различных значениях температуры: значки — эксперимент [11], сплошные линии — расчет, штриховая — модельная кривая равновесия жидкость — пар

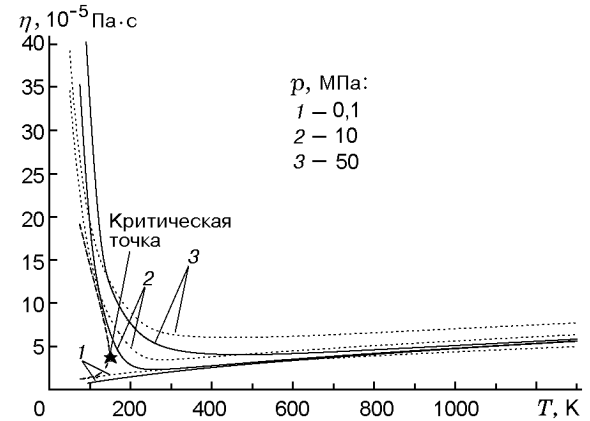


Рис. 2. Зависимость вязкости кислорода от температуры при различных значениях давления и на линии равновесия жидкость — пар для кислорода:

сплошные линии — эксперимент [11], пунктирные — расчет, штриховая — расчет вязкости вдоль кривой равновесия жидкость — пар

где  $V_0 = 0,678 \text{ см}^3/\text{г}$ ,  $\alpha = 7,937$ ,  $A = 0,668 \text{ ГПа}$  (размерность  $V_c$  —  $\text{см}^3/\text{г}$ ;  $p_T$  — ГПа). Давление  $p_{пр}$  в выражении (1) использовалось (введена эмпирическая температурная зависимость) в виде

$$p_{пр} = -A \left( \frac{V_0}{V} \right)^2 \left( \frac{\gamma \exp(-\lambda T) + 1}{\gamma + 1} \right), \quad (19)$$

где  $A, V_0$  — те же параметры, что и в выражении (18),  $\gamma = 3$ ,  $\lambda = 0,01$  (размерность  $p_{пр}$  — ГПа,  $T$  — К). На рис. 1 изображены также модельная кривая равновесия жидкость — пар,

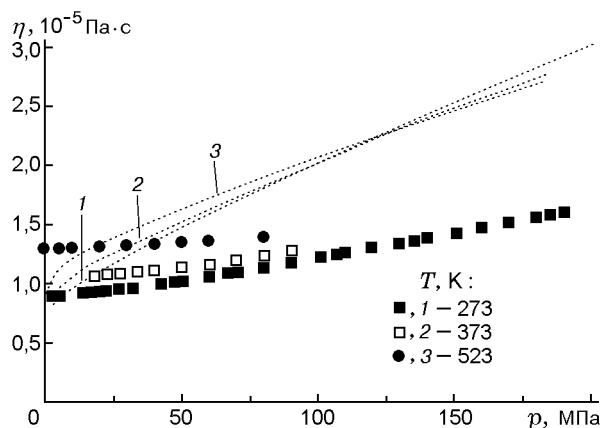


Рис. 3. Зависимость вязкости водорода от давления при различных значениях температуры:

значки — эксперимент [10], линии — расчет

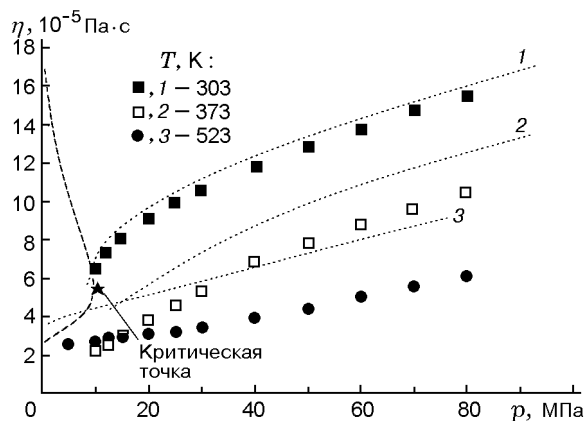


Рис. 4. Зависимость вязкости двуокиси углерода от давления при различных значениях температуры:

значки — эксперимент [10], линии 1–3 — расчет, штриховая — расчет вязкости на кривой равновесия жидкость — пар

рассчитанная по правилу площадей Максвелла, и критическая точка, определяемая из условий  $(\partial p/\partial V)_T = (\partial^2 p/\partial V^2)_T = 0$ . Расчетные параметры критической точки  $O_2$  следующие:  $p = 6,1$  МПа,  $T = 155,6$  К,  $V = 2,47$  см<sup>3</sup>/г. Приблизительно такое же описание (с определяющими зависимостями в виде (18), (19)) данных по изотермической сжимаемости в области относительно низких давлений, как на рис. 1 для  $O_2$ , получено и для других веществ (за исключением полярных воды и аммиака вблизи кривой равновесия). Модель (1)–(3), (18), (19) удовлетворительно (хотя возможны некоторые уточнения) согласуется с результатами опытов по ударному сжатию данных веществ в исход-

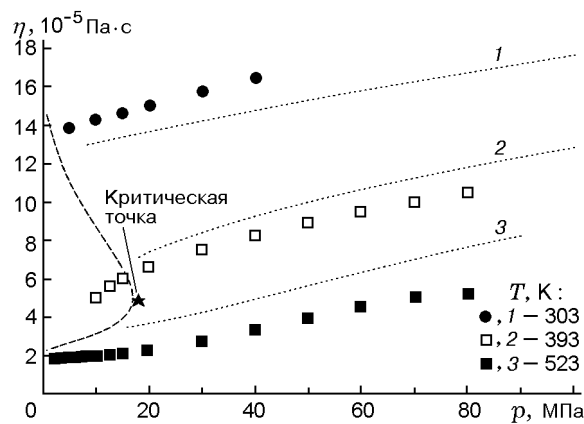


Рис. 5. Зависимость вязкости аммиака от давления при различных значениях температуры:

значки — эксперимент [10], линии 1–3 — расчет, штриховая — расчет вязкости на кривой равновесия жидкость — пар

но жидком состоянии до давлений  $p \approx 50$  ГПа (при расчетах используется не только термическое, но и полное уравнение состояния). Для сравнения на рис. 2 приведены модельная (15) и экспериментальная зависимости вязкости кислорода от температуры на различных изобарах. На рис. 3–5 представлены результаты расчетов и экспериментов на различных изотермах для  $H_2$ ,  $CO_2$  и  $NH_3$ . Как видно из рис. 2–5, модель качественно воспроизводит основные закономерности реального поведения вязкости, в том числе на обеих ветвях кривой равновесия жидкость — пар. Двухзначность вязкости на последней связана с тем, что на разных ветвях при одинаковых значениях  $p$ ,  $T$  величины  $V$  и  $V_c$ , входящие в выражение (15), различаются. Аналогичны результаты и для других веществ, входящих в состав продуктов взрыва. Подобная ситуация наблюдается и для металлов приблизительно в той же области состояний  $p$ ,  $T$  [6].

Различия результатов расчета и эксперимента на рис. 2–5 обусловлены рядом причин. В опытах по сжимаемости измеряются единые  $p$ – $V$ – $T$ -зависимости, а не отталкивание и притяжение по отдельности. При воспроизведении суммарных характеристик возможны ошибки в каждом из слагаемых, поэтому не исключены некоторые неточности, в частности, в коволюме, входящем в формулу для вязкости (15). Простое выражение для  $V_c$  (15) в целом передает характер поведения коволюма, однако в локальных областях может быть недостаточно адекватным. В частности, более сильная, чем

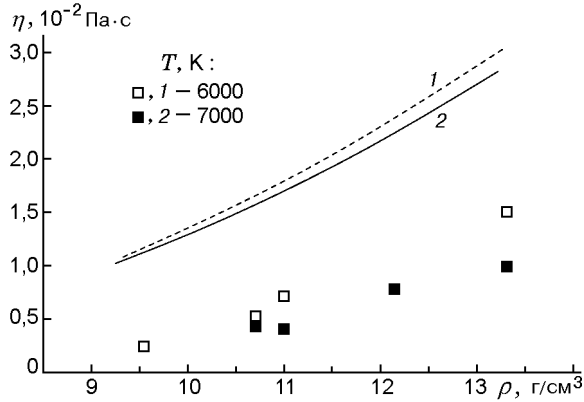


Рис. 6. Зависимость вязкости жидкого железа от плотности при различных значениях температуры:

значки — расчет [12], линии — настоящая модель

в эксперименте, зависимость вязкости от давления (см. рис. 2) при высоких температурах ( $\approx 1000$  К) для  $O_2$  (и систематически для других веществ) может быть связана с переоценкой влияния давления на коволюм в области объемов, превышающих объем конденсата  $V_0$ , которой отвечают значения  $p_T \leq A$  (в области сжатия  $p_T \geq A$ ). Не исключена также некоторая зависимость  $V_c$  от температуры (помимо основной зависимости от  $p_T$ ). Расхождения могут быть вызваны и другими упрощениями, например, предположением о постоянстве  $b$  в выражении (7). Для более детального описания поведения вязкости могут быть внесены необходимые уточнения.

Поскольку при расчете вязкости на основе выражения (15) «привязка» к экспериментальным данным отсутствует, то в рамках описанного подхода можно ожидать приблизительно той же точности оценки ( $\approx 2$ ) и при более высоких (по сравнению с рис. 2–5) значениях  $p$ ,  $T$ , при которых уравнение состояния (1)–(3) согласуется с термодинамическими данными. Некоторым подтверждением этому служит качественное согласие модели [6] (в расчетах используется широкодиапазонное уравнение состояния из [7, 8]) с расчетами [12] вязкости жидкого железа в условиях, характерных для ядра Земли (расчеты в [12] выполнены методом молекулярной динамики). В качестве примера на рис. 6 приведено сопоставление расчетных зависимостей вязкости  $\eta$  от плотности  $\rho$  на изотермах  $T = 6000$  и  $7000$  К ( $p \approx 100 \div 300$  ГПа). Порядок величины и характер поведения вязкости в обоих случаях близки. Аналогичное со-

ответствие имеется и для коэффициента самодиффузии [6] и [12].

Расчетное значение вязкости ударно-сжатой воды при  $p \approx 10$  ГПа составляет  $\approx 1,3 \cdot 10^{-3}$  Па·с.

## 2. МОДЕЛЬНАЯ ВЯЗКОСТЬ СМЕСИ

Модель уравнения состояния (1)–(3) допускает обобщение для смесевых жидкостей [8, 9]. Выражение для свободной энергии  $F$  смеси представляется в следующем параметрическом ( $T$ ,  $p_T$ ,  $N_i$ ) виде:

$$F = E_T(p_T, T, NS) + E_{np}(V, T, NS) -$$

$$- kT \sum_i N_i \ln \frac{eNT^{5/2} \sigma_i(T) r_i}{N_i p_T}, \quad (20)$$

$$V = V_c(p_T, T, NS) + \frac{NkT}{p_T}, \quad (21)$$

где

$$E_T = - \int_0^{p_T} p_T \left( \frac{\partial V_c(p_T, T, NS)}{\partial p_T} \right)_{T, NS} dp_T, \quad (22)$$

$$E_{np} = - \int_{\infty}^V p_{np}(V, T, NS)_{T, NS} dV. \quad (23)$$

Здесь индекс  $i$  соответствует частицам  $i$ -го сорта,  $N_i$  — число  $i$ -х частиц в объеме  $V$ ,  $N = \sum_i N_i$  — полное число частиц (здесь и в (20) суммирование проводится по всем частицам смеси),  $NS$  — совокупность всех значений чисел  $N_i$ , определяющая состав смеси,  $r_i = k^{5/2} \left( \frac{m_i}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$ ,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $m_i$  — масса  $i$ -й частицы,  $\sigma_i(T)$  — внутренняя статистическая сумма частицы. В выражениях (20)–(23) учтены возможные зависимости  $V_c$  и  $p_{np}$  от  $T$  и  $NS$ . Интегралы (22), (23) вычисляются при  $T = \text{const}$ ,  $NS = \text{const}$ . При конкретном построении уравнения состояния на основе модели (20)–(23) характеристики  $V_c$  и  $p_{np}$  предполагаются заданными функциями своих параметров.

Из (20)–(23) следует выражение для давления  $p = -(\partial F / \partial V)_{T, NS}$ :

$$p = \frac{NkT}{V - V_c(p_T, T, NS)} + p_{\text{пр}}(V, T, NS), \quad (24)$$

которое является обобщением (1). В состоянии термодинамического равновесия величины  $N_i$  определяются из условия минимума  $F$  при дополнительных условиях материального баланса в химических реакциях. Для упрощения системы уравнений равновесия используются следующие предположения. Коволлюм  $V_c$  полагается аддитивным по отношению к коволюмам компонентов  $v_{ci}$  (в расчете на одну частицу):

$$V_c(p_T, T, NS) = \sum_i N_i v_{ci}(p_T, T). \quad (25)$$

Притяжение смеси (для ПВ его роль невелика) конструируется на основе характеристик индивидуальных компонентов, определяемых выражениями (19), по эмпирической схеме, обычно используемой для ВдВ-смесей [13]. При таких предположениях уравнения равновесия для определения  $N_i$  значительно упрощаются и аналогичны уравнениям для смеси идеальных газов [9].

Модельная вязкость смеси  $\eta_{\text{см}}$  определялась способом, аналогичным описанному выше для простой жидкости. В смеси присутствуют частицы с различными массами  $m_i$ , средними тепловыми скоростями  $v_i \sim (kT/m_i)^{1/2}$ , расстояниями  $l_i$  и  $L_i$ . Величина  $l_i$  представляет собой расстояние, которое проходит центр массы  $i$ -й частицы за время  $\tau_i \sim l_i/v_i$  потери импульса  $m_i v_i$  ( $l_i$  может отличаться от длины свободного пробега; в частности, для тяжелых частиц из-за относительно малой потери импульса в столкновениях с легкими она больше последней);  $L_i$  — полное (с учетом коволюма) расстояние, на которое за время  $\tau_i$  среде передается импульс  $i$ -й частицы  $m_i v_i$ . Полные величины  $p_{XX}$  и  $p_{XY}$  смеси определяются суммами выражений (9), (11) компонентов, т. е.

$$p_{XX} \sim \sum_i \frac{kTN_i L_i}{V l_i}, \quad (26)$$

$$\eta_{\text{см}} \sim \sum_i \frac{m_i v_i N_i L_i^2}{V l_i}. \quad (27)$$

Детальный анализ процесса столкновений и определение параметров  $l_i$ ,  $L_i$  в многокомпонентной смеси крайне сложны, поэтому исполь-

зуются упрощения. Выражение для  $p_T$  в соотношении (24) можно получить из формулы (26), положив в ней

$$\frac{L_i}{l_i} = \frac{V}{V - V_c}, \quad (28)$$

где  $V_c$  определяется выражением (25). Соотношения (28), как и соотношение (13) для простой жидкости, собственно, являются определением модели. Полагается также, что в смеси импульс  $m_i v_i$  любой частицы передается на дополнительное по сравнению с  $l_i$  расстояние порядка среднего коволюмного «размера» в расчете на одну частицу смеси (аналогично (7)), т. е.

$$L_i = l_i + b_i \left( \frac{V_c}{N} \right)^{1/3}, \quad (29)$$

где  $b_i = \text{const}$ . Из (28), (29) следует

$$L_i = b_i \frac{V/N}{(V_c/N)^{2/3}}. \quad (30)$$

Подстановка (28), (30) в (27) дает

$$\eta_{\text{см}} = \eta_0 \frac{T^{1/2}}{(V_c/N)^{2/3}} \left( \frac{V}{V - V_c} \right) \times \sum_i \frac{N_i (M_i)^{1/2}}{N}, \quad (31)$$

где  $\eta_0$  — та же величина, что и в (15). При записи выражения (31) использовалось условие его перехода в «индивидуальную» вязкость (15) для однокомпонентного вещества. Определение вязкости проводится совместно с расчетом уравнения состояния смеси на основе соотношений (20)–(25).

Модельная вязкость (31) сопоставлялась с экспериментальными и более точными расчетными данными. При построении уравнений состояния смесей использовались уравнения состояния компонентов из § 1.

На рис. 7 приведены расчетные и экспериментальные данные по вязкости для воздуха (78 %  $N_2$  и 22 %  $O_2$ ), а на рис. 8 — для смеси 50 %  $H_2$  и 50 %  $N_2$ . На рис. 9 показана зависимость вязкости смеси  $H_2 + N_2$  от содержания  $N_2$  на изобаре  $p = 10$  МПа при температурах  $T = 273$  и  $1073$  К. Расчеты, результаты которых приведены на рис. 7–9, проводились при замороженном составе. Точность

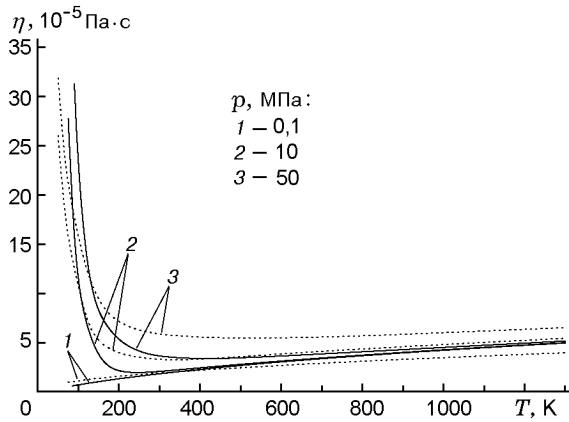


Рис. 7. Зависимость вязкости воздуха от температуры при различных значениях давления: сплошные линии — эксперимент [11], пунктирные — расчет

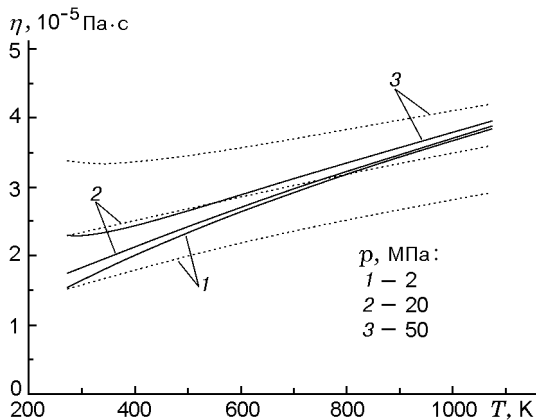


Рис. 8. Зависимость вязкости смеси 50 %  $H_2$  + 50 %  $N_2$  от температуры при различных значениях давления: сплошные линии — эксперимент [11], пунктирные — расчет

описания экспериментальных значений вязкости для смесей примерно такая же, как и для индивидуальных веществ. На рис. 10 модельная вязкость (31) сопоставляется с расчетными данными [11] для диссоциирующей воды. Учитывались компоненты  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $OH$ ,  $H$  и  $O$ , концентрации которых меняются в зависимости от термодинамических условий. В этих расчетах, как и ниже для ПВ, использовались данные [14] относительно зависимостей  $\sigma_i(T)$  для компонентов, входящих в выражение (20). Результаты, аналогичные показанным на рис. 7–10, получены и для других смесей.

Вероятно, такую же точность ( $\approx 2$ ) прогноза вязкости следует ожидать и при давлени-

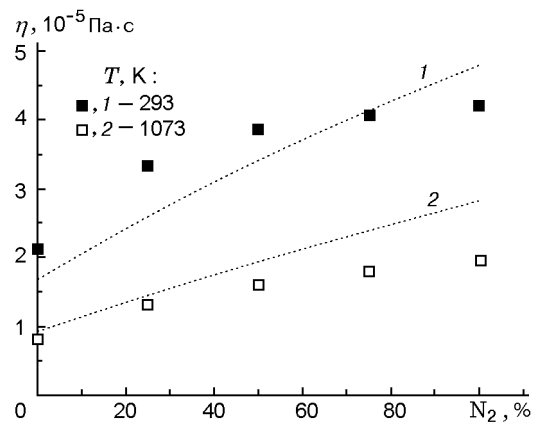


Рис. 9. Зависимость вязкости смеси водород — азот от объемной концентрации азота при  $p = 10$  МПа и различных значениях температуры:

значки — эксперимент [11], линии — расчет

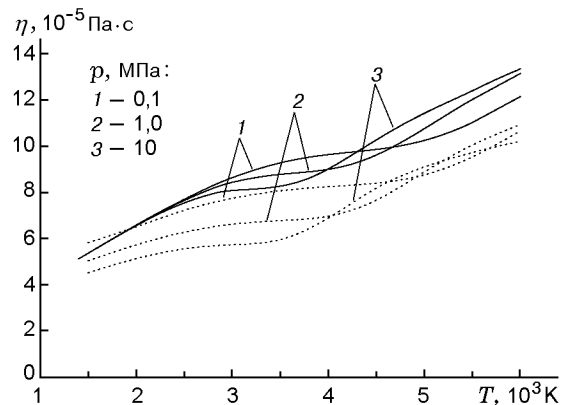


Рис. 10. Зависимость вязкости диссоциирующей воды от температуры при различных значениях давления:

сплошные линии — расчет [11], пунктирные — настоящая модель

ях, более высоких по сравнению с рассмотренными выше, где применима модель уравнения состояния (20)–(25) (способ расчета не имеет принципиальных отличий). На основе соотношения (31) была рассчитана вязкость ПВ исходно конденсированных гексогена, тэна и нитрометана. ПВ этих веществ содержат небольшое количество конденсированного углерода, и модель уравнения состояния химически реагирующей смеси неплохо воспроизводит их детонационные параметры (если это не так, то требуются уточнения). В расчетах с привлечением условия Чепмена — Жуге получены следующие значения скорости детонации  $D$  и де-



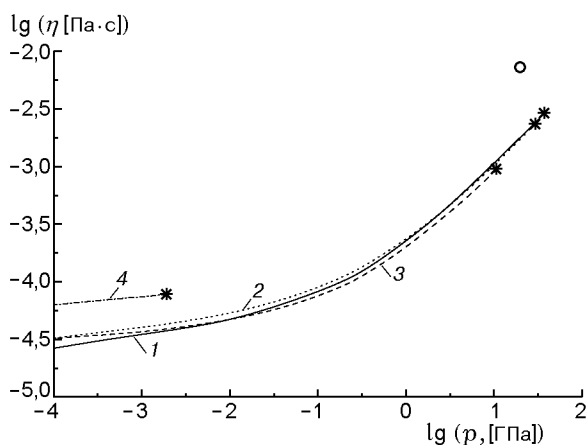


Рис. 11. Модельные зависимости вязкости продуктов взрыва от давления вдоль изоэнтроп расширения от состояния Чепмена — Жуге (помечено звездочкой) до атмосферного давления для гексогена (1), тэна (2), нитрометана (3) и гремучей смеси (4):

кружок — оценка значения вязкости для водонаполненного гексогена [16]

тонационных параметров: для гексогена с начальной плотностью  $\rho_0 = 1,8 \text{ г/см}^3$  —  $D = 8,76 \text{ км/с}$ ,  $p = 36,7 \text{ ГПа}$ ,  $T = 3400 \text{ К}$ , для тэна ( $\rho_0 = 1,77 \text{ г/см}^3$ ) —  $D = 8,44 \text{ км/с}$ ,  $p = 29,5 \text{ ГПа}$ ,  $T = 4280 \text{ К}$ , для нитрометана ( $\rho_0 = 1,13 \text{ г/см}^3$ ) —  $D = 6,09 \text{ км/с}$ ,  $p = 10,7 \text{ ГПа}$ ,  $T = 3530 \text{ К}$ . Эти значения близки к реальным данным [15]. В целом удовлетворительно описываются и метательные свойства ПВ (определяются «ходом» изоэнтропы расширения от состояния Чепмена — Жуге до давлений, близких к атмосферному). На рис. 11 приведены расчетные зависимости вязкости ПВ этих составов на кривых изоэнтропического расширения в диапазоне от давления Чепмена — Жуге до атмосферного ( $1,01325 \cdot 10^{-4} \text{ ГПа}$ ). Для сравнения показан также результат расчета для газообразной гремучей смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  (исходное состояние до детонации —  $p = 0,1 \text{ МПа}$ ,  $T = 298 \text{ К}$ ; модельные детонационные параметры —  $D = 2,85 \text{ км/с}$ ,  $p = 0,0019 \text{ ГПа}$ ,  $T = 3700 \text{ К}$ ). По имеющейся у нас информации, модельные результаты расчетов, представленные на рис. 11, можно сопоставить только с оценочным значением вязкости ПВ водонаполненного гексогена [16], полученным при модельной интерпретации процесса детонации в этом ВВ с добавкой порошка вольфрама. Авторы [16] отмечают, что хорошим результатом являлась бы и верная оценка порядка приводимого ими

значения вязкости. Настоящие расчетные значения для гексогена отличаются от данных [16] примерно в пять раз.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложено простое модельное выражение для «быстрой» оценки вязкости смесевых жидкостей и плотных газов, основывающееся на знании только уравнения состояния. Проведено его тестирование при относительно низких давлениях. Значения модельной вязкости отличаются от реальной примерно в два раза в широком диапазоне температур. Поскольку вязкость в области низких и высоких давлений рассчитывается в рамках единой модели, можно ожидать, что в обоих случаях (при условии адекватности уравнения состояния) точность прогноза вязкости будет приблизительно одинаковой. Оценочное значение вязкости ПВ конденсированных ВВ изменяется значительно (на два порядка) при снижении давления от детонационного до атмосферного.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Altshuler L. V. Viscosity of water and glycerin behind a shock wave front // Shock Compression of Condensed Matter-1991 / D. T. Schmidt, R. D. Dick, J. W. Forbes, D. G. Tasker (Eds). Elsevier Science Publishers B. V., 1992. P. 75–78.
2. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1945.
3. Гиршфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
4. Бачинский А. И. Избранные труды. М.: Изд-во АН СССР, 1960.
5. Люстерник В. Е., Воронин М. П. О едином уравнении вязкости жидкости и газа // Теплофизика высоких температур. 1983. Т. 21, № 3. С. 464–470.
6. Медведев А. Б. Коэффициенты переноса в модифицированной модели Ван-дер-Ваальса // Теплофизика высоких температур. 1995. Т. 33, № 2. С. 227–235.
7. Медведев А. Б. Модель уравнения состояния с учетом испарения, ионизации и плавления // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1992. Вып. 1. С. 23–29.
8. Kopyshov V. P., Medvedev A. B. Thermodynamic model of dense and heated matter // Sov. Tech. Rev. B. Therm. Phys. Rev. 1993. V. 5. P. 37–93.

9. **Медведев А. Б.** Модификация модели Ван-дер-Ваальса для плотных состояний // Ударные волны и экстремальные состояния вещества / Под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Алтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. М.: Наука, 2000.
10. **Голубев И. Ф.** Вязкость газов и газовых смесей. М.: Физматгиз, 1959.
11. **Варгафтик Н. Б.** Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972.
12. **Alfe D., Kresse G., Gillan M. J.** Structure and dynamics of liquid iron under Earth's core conditions // Phys. Rev. B. 2000. V. 61, N 1. P. 132–142.
13. **Вукалович М. П., Новиков И. И.** Уравнение состояния реальных газов. М.; Л.: Госэнергоиздат, 1948.
14. **Термодинамические** свойства индивидуальных веществ. Справочник / Под ред. В. П. Глушко. М.: Наука, 1978–1982. Т. 1–4.
15. **Мейдер Ч.** Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
16. **Давыдова О. Н., Кузнецов Н. М., Лавров В. В., Шведов К. К.** О недосжатой детонации конденсированных ВВ с инертными примесями // Хим. физика. 1999. Т. 18, № 4. С. 53–66.

*Поступила в редакцию 10/II 2003 г.*