

УДК 519.635.8.53.09

МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ УДАРНОГО СЖАТИЯ ПЛАСТИНЧАТОЙ ГРАДИЕНТНОЙ СМЕСИ

А. А. Голышев, В. В. Ким, А. Н. Емельянов, А. М. Молодец

Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, Россия

E-mails: golyshev@icp.ac.ru, kim@icp.ac.ru, emelyanov@icp.ac.ru, molodets@icp.ac.ru

Численно исследовано ударно-волновое нагружение градиентной смеси в диапазоне давлений $20 \div 150$ ГПа. В рамках предложенной модели, являющейся модификацией модели пластинчатых пористых материалов, дополненной алгоритмом, позволяющим рассчитывать изменение термодинамических и кинематических параметров каждой частицы, а также образца в целом, рассмотрено ударное сжатие пластинчатой градиентной смеси вольфрам — пористая медь. Показано, что полученные в результате расчетов параметры состояния этой ударно-сжатой смеси в координатах давление — массовая скорость согласуются с экспериментальными данными для реальной вольфрамово-медной смеси.

Ключевые слова: смеси, градиентные материалы, ударные волны, высокие давления.

DOI: 10.15372/PMTF20150409

Введение. К градиентным смесям, представляющим собой гетерогенные материалы, в которых имеют место большие градиенты физико-механических характеристик, относятся многие механические смеси различных порошков, ряд горных пород, продукция порошковой металлургии и др. Поведение градиентных смесей в условиях сильного ударного сжатия исследуется как экспериментально (см. [1–3]), так и теоретически (см. [3–5]).

В теоретических работах предложены модели и уравнения состояния градиентных смесей для широкого диапазона пористостей и давлений ударного сжатия. В большинстве таких работ градиентная смесь моделируется в рамках механики сплошных сред с использованием средневзвешенных характеристик компонентов смеси: среднего модуля объемного сжатия, средней теплоемкости, среднего коэффициента Грюнайзена и др. При таком подходе бесконечно малый объем существенно превышает объемы частиц смеси, поэтому предсказать термодинамическое поведение различных частиц смеси при ударном сжатии невозможно. Однако в ряде задач, таких как управление химическими реакциями или полиморфными переходами в частицах градиентной смеси при ударно-волновом нагружении, эта информация необходима. Поэтому в настоящее время широкое распространение получили численные модели, описывающие свойства гетерогенного материала путем непосредственного расчета формоизменения частиц компонентов смеси в рамках гидродинамического кода (см., например, работы [6, 7]). В таких моделях физически бесконечно малый объем значительно меньше размеров частиц, что позволяет учитывать

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 12-02-31383) и в рамках программы Президиума РАН “Вещество при высоких плотностях энергии”.

трехмерные эффекты, возникающие при движении отдельных частиц, и адекватно прогнозировать свойства реальных порошков и монолитных градиентных материалов.

Следует отметить, что среди множества градиентных смесей можно выделить смеси, состоящие из тонких (толщиной порядка 10^{-6} м) контактирующих пластин, выполненных из различных материалов. Очевидно, что численное моделирование параметров таких пластинчатых градиентных смесей в условиях одномерного ударного сжатия в направлении, перпендикулярном плоскости пластин, является более простой задачей, чем моделирование изотропных градиентных смесей. При этом мощности современных компьютеров позволяют моделировать ударное сжатие образцов, состоящих из нескольких сотен слоев толщиной порядка 10^{-6} м, без использования осредненных теплофизических характеристик компонентов смеси и таким образом рассчитывать термодинамическое поведение каждой частицы-слоя. Можно также предположить, что при оптимальном выборе уравнений состояния компонентов пластинчатой смеси и геометрических соотношений между ними результаты расчета термодинамических (давления, температуры, энергии и др.) и кинематических (массовой скорости) параметров могут удовлетворительно описывать и изотропную градиентную смесь.

Предлагаемая в настоящей работе модель пластинчатой градиентной смеси представляет собой модификацию модели слоистой среды [3] в сочетании с моделью пластинчатого пористого материала [8]. Модификация модели слоистой среды заключается в ее дополнении алгоритмом, позволяющим без использования осреднений рассчитывать изменение термодинамических и кинематических параметров каждой частицы, а также образца в целом.

1. Модель пластинчатой градиентной смеси. Рассмотрим модель на примере пластинчатой градиентной смеси, состоящей из вольфрама, меди и воздуха (рис. 1). Данная смесь представляет собой набор тонких пластин меди 1 толщиной γ , чередующихся с пластинами вольфрама 2 толщиной δ и слоями воздуха 3 толщиной ε (см. рис. 1, а). Геометрические параметры модели δ , γ , ε выбирались таким образом, чтобы они коррелировали с параметрами медно-вольфрамового пористого материала элконит 2125С [3] (см.

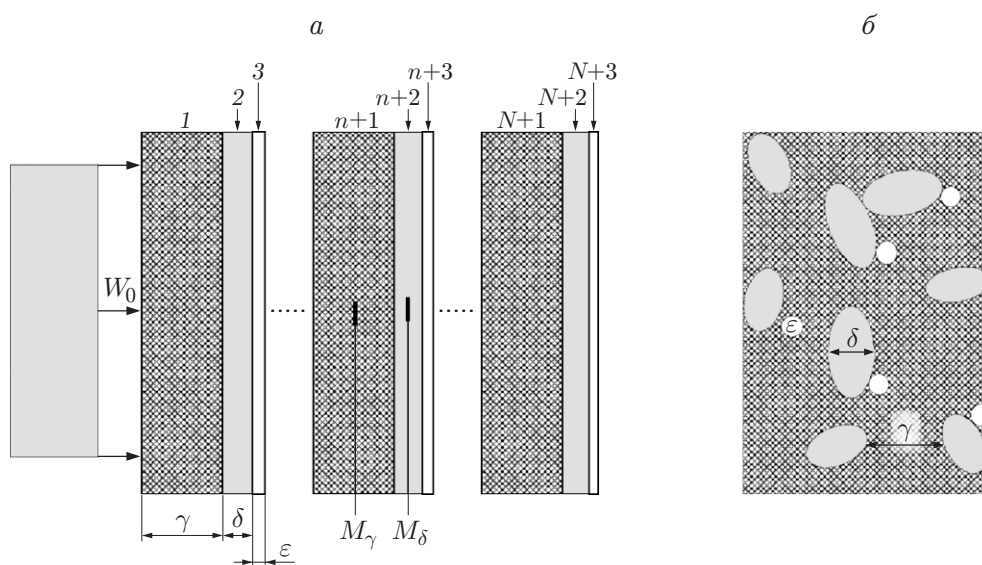


Рис. 1. Модель градиентной смеси и схема ее одномерного ударно-волнового нагружения (а) и структура элконита 2125С [3] (б):

1 — медь, 2 — вольфрам, 3 — воздух; M_γ — Cu-маркер, M_δ — W-маркер

рис. 1, б). Согласно [3] элконит 2125С состоит из частиц вольфрама (плотность ρ_{0W} , массовая доля $\eta_W = 25,5\%$) и медной матрицы (плотность ρ_{0Cu} , массовая доля $\eta_{Cu} = 74,5\%$). Пористость элконита 2125С (отношение расчетной плотности ρ_0 к измеренной ρ_{00}) составляет $p = \rho_0/\rho_{00} = 1,07$. В соответствии с этими характеристиками, во-первых, задавалась толщина δ (см. рис. 1, а), равная размеру частиц вольфрама: $\delta = 10$ мкм; во-вторых, определялась толщина медных слоев: $\gamma = \delta\rho_{0W}\eta_{Cu}/(\rho_{0Cu}\eta_W) = 63,3$ мкм; наконец, толщина слоев воздуха ε выбиралась таким образом, чтобы пористость модельного образца была равна пористости p реального образца элконита 2125С. Из этого условия имеем $\varepsilon = (\delta + \gamma)(p - 1)/(1 - p\rho_{0a}/\rho_{00})$, где ρ_{0a} — плотность воздуха. Поскольку плотность воздуха существенно меньше плотности элконита ($\rho_{0a} \ll \rho_{00}$), знаменатель в формуле для ε практически равен единице, следовательно, $\varepsilon \simeq 5$ мкм. Поэтому далее слои воздуха будем считать “заполненными вакуумом”. Заметим, что представление пористого материала в виде пластин, разделенных воздушными (вакуумными) слоями, означает встраивание модели пластинчатого пористого материала [8] в модель пластинчатой градиентной смеси. Таким образом, модельный образец пластинчатой градиентной смеси содержал $N = 50$ слоев каждой фазы: вольфрама, меди и “вакуума”.

Ударно-волновое нагружение моделировалось путем задания скорости W_0 вольфрамовой пластины-ударника толщиной 3,5 мм. В данной работе использован одномерный алгоритм, в основу которого положена модификация численного метода индивидуальных частиц. В этом методе непрерывная идеальная невязкая сжимаемая среда представлена в виде ансамбля конечно-размерных (т. е. определенного размера) лагранжевых частиц, движущихся через неподвижную равномерную регулярную эйлерову сетку. Для расчета разрывных решений (ударные волны) используется метод добавления искусственной вязкости. Метод имеет первый порядок точности по пространству (времени); размер шага по времени определяется из условия устойчивости Куранта. Метод позволяет рассчитывать сложные течения с множеством границ раздела, большими градиентами плотности и давления. Алгоритм разработан на основе данных работы [9].

Для расчета термодинамических параметров и замыкания уравнений движения в алгоритме использованы разработанные согласно [10] полуэмпирические уравнения состояния вольфрама и меди (см. п. 3). Профили (зависимости от времени t) давления $P(t)$, массовой скорости $u(t)$, температуры $T(t)$, объема $V(t)$, энергии и т. д. вычислялись в середине заранее выбранных частиц-слоев (медных M_γ и (или) вольфрамовых M_δ). Теплообмен между слоями не учитывался.

2. Результаты моделирования и их обсуждение. На рис. 2 показаны характерные осциллирующие профили давления при $N = 50$, $n = 7$, $W_0 = 3,5; 1,5$ км/с. Видно, что в начальный момент времени давление испытывает значительные колебания.

С течением времени амплитуды колебаний давления ΔP уменьшаются. Резкое уменьшение давлений в момент времени $t \approx 1$ мкс обусловлено приходом волны разгрузки со свободной поверхности ударника. К этому моменту давления в вольфрамовом и медном слоях выходят на установившиеся значения P_δ и P_γ . При этом равенство $P_\delta \approx P_\gamma = P$ выполняется с точностью до $0,5\Delta P$. Время выхода на установившиеся значения зависит от скорости ударника. Из рис. 2, а, б следует, что уменьшение скорости ударника приводит к увеличению времени выхода на установившееся значение P . Аналогичный осциллирующий характер с выходом на одинаковые установившиеся значения имеют профили массовой скорости, температуры и объема. На рис. 2, в показаны осциллирующие профили удельного объема $V(t)$, которые описывают процесс изменения формы одномерных частиц пластинчатой гетерогенной смеси.

При $N = 100$, $n = 50$ волна разрежения приходит со свободной поверхности позднее и форма профилей повторяет форму профилей при $N = 50$, $n = 7$. При этом расчеты

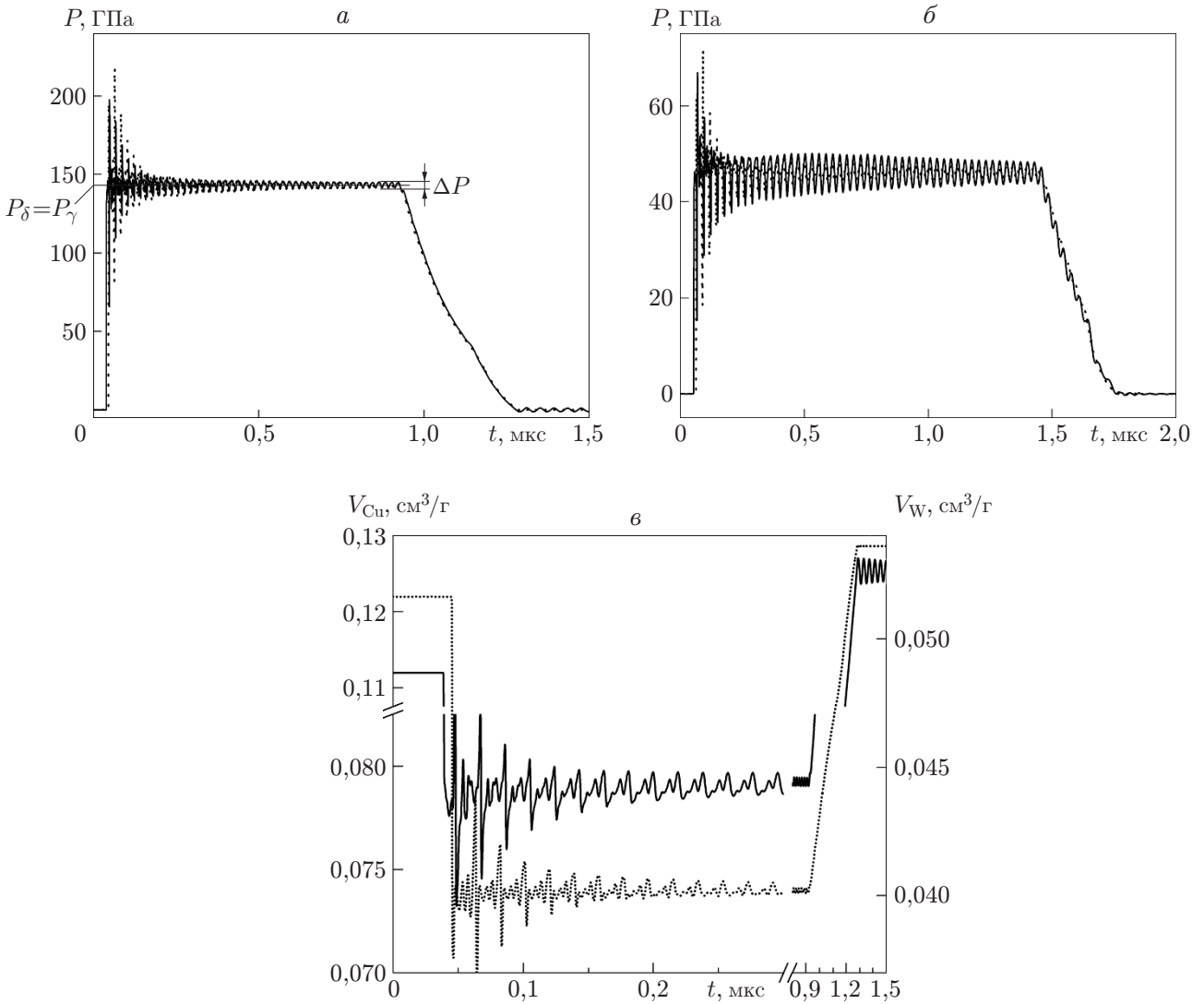


Рис. 2. Зависимости давления (а, б) и удельного объема (в) от времени при $N = 50, n = 7$: а, в — $W_0 = 3,5$ км/с, б — $W_0 = 1,5$ км/с; сплошные линии — Cu-маркер M_γ , пунктирные — W-маркер M_δ

показывают, что передний фронт профилей распространяется с постоянной скоростью D , а значения $\Delta P, P_\delta \approx P_\gamma = P$ остаются прежними. Это означает, что форма профилей стационарна. При этом выполняется соотношение $P = \rho_{00}Du$.

Заметим, что в рассматриваемой пластинчатой модели исключены контакты вольфрамовых частиц между собой, в то время как в реальном изотропном смесевом материале такие контакты имеются. Однако ранее в работах, посвященных моделированию градиентных смесей (см., например, [3]), отмечалось, что пластинчатая модель лучше описывает реальный материал по мере уменьшения содержания вольфрама в композите. Это обусловлено тем, что при уменьшении концентрации частиц вольфрама уменьшается вероятность контакта между ними. Возможно, границу области применимости пластинчатой модели можно определить условием, согласно которому расстояние между частицами вольфрама l_δ больше размеров δ самих частиц. В предположении, что частицы вольфрама имеют форму сферы, получаем $l_\delta \approx \delta \left(\frac{52,36}{\eta_W} \frac{\rho_{0W}}{\rho_{00}} \right)^{1/3}$, для элконита 2125С $l_\delta \approx 1,6\delta$. Эта

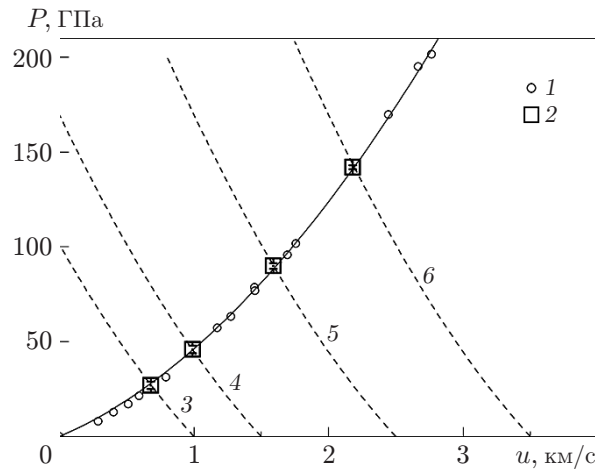


Рис. 3. Установившиеся (P - u)-состояния элконита 2125С:

1 — эксперимент [3], 2 — области, в которых проводились расчеты по слоистой модели элконита 2125С при различных скоростях W_0 вольфрамового ударника (длина стороны квадрата равна ΔP); сплошная линия — ударная адиабата для элконита 2125С [3], штриховые — ударные адиабаты для вольфрама с различными начальными состояниями (3 — $W_0 = 1,0$ км/с, 4 — $W_0 = 1,5$ км/с, 5 — $W_0 = 2,5$ км/с, 6 — $W_0 = 3,5$ км/с)

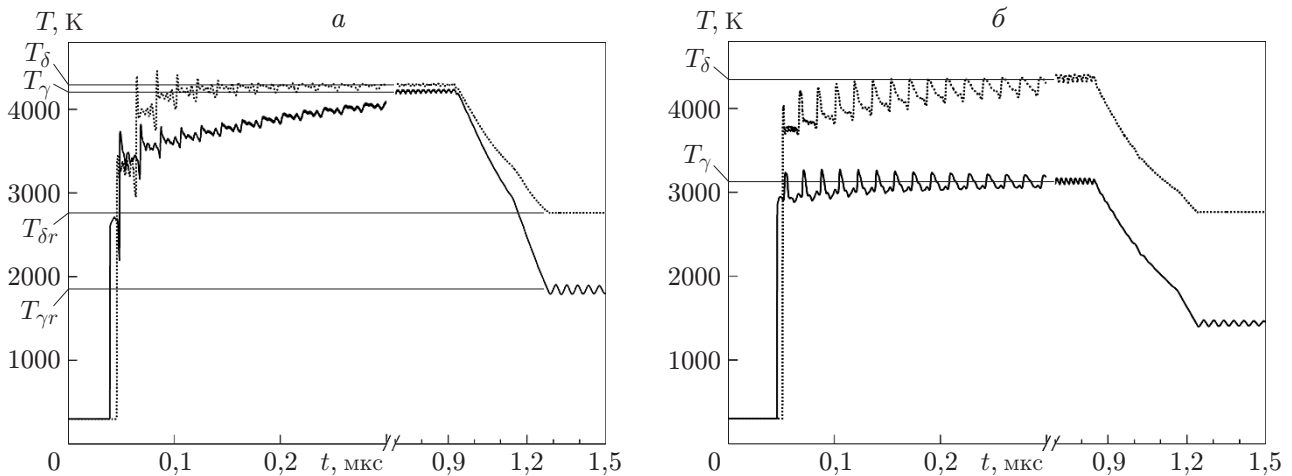


Рис. 4. Зависимости температуры от времени при $N = 50$, $n = 7$, $W_0 = 3,5$ км/с:

a — образец из слоев меди, вольфрама и “вакуума”, b — “беспористый” образец из монокристаллических слоев меди и вольфрама; сплошные линии — Cu-маркер M_γ ; пунктирные — W-маркер M_δ

оценка свидетельствует о правомерности сравнения результатов выполненных модельных расчетов с результатами ударно-волнового эксперимента для элконита 2125С.

Анализ профилей, полученных при скоростях ударника $W_0 = 1,0; 1,5; 2,5; 3,5$ км/с, показывает, что в диапазоне давлений ударного сжатия $20 \div 150$ ГПа расчетные точки, соответствующие установившимся (P - u)-состояниям элконита 2125С, с точностью до $0,5\Delta P$ совпадают с экспериментальными [3] (рис. 3). Это означает, что результаты расчетов давления ударного сжатия и массовой скорости образца могут служить удовлетворительным приближением и для изотропной градиентной смеси.

На рис. 4 приведены профили температуры для Cu-маркера M_γ и W-маркера M_δ при $N = 50$, $n = 7$, $W_0 = 3,5$ км/с. Видно, что каждый профиль температуры также выходит на установившееся значение T_δ , T_γ . Однако, как и предполагалось, $T_\delta \neq T_\gamma$. Остаточные

температуры вольфрамового $T_{\delta r}$ и медного $T_{\gamma r}$ слоев также не равны. Наряду с этим модельные расчеты термомеханического поведения исследуемой слоистой модели при ударно-волновом нагружении показали, что соотношение между T_{δ} и T_{γ} зависит от положения “вакуумного” слоя толщиной ε . Так, если “вакуумный” слой расположить не за вольфрамовым слоем толщиной δ , как это показано на рис. 1, *a*, а перед ним (т. е. между медным и вольфрамовым слоями), то величина T_{δ} будет существенно (в два раза) превышать величину T_{γ} . Данное различие соответствует двум вариантам распределения пор: в первом случае все поры сосредоточены в меди, во втором — в вольфраме. Это подтверждают результаты моделирования указанных двух вариантов в рамках прежнего алгоритма, но с использованием модели [11], в которой предполагается, что пористый гетерогенный материал является гомогенной средой, содержащей дополнительный параметр p — отношение плотности монолитной матрицы к средней плотности пористого материала. В первом варианте пористые слои меди толщиной $\gamma = 0,063$ мм и пористостью $p = 1,07$ чередуются с монолитными вольфрамовыми слоями толщиной $\delta = 0,01$ мм; во втором — монолитные медные слои толщиной $\gamma = 0,063$ мм чередуются с пористыми вольфрамовыми слоями толщиной $\delta = 0,01$ мм и такой же пористостью $p = 1,07$. Оба варианта дают результаты, близкие к результатам расчетов по пластинчатой модели с различным положением “вакуумного” слоя. При этом, как и в случае пластинчатой модели, температуры пористых слоев вольфрама $T_{\delta p}$ приблизительно в два раза больше температуры монолитных медных слоев $T_{\gamma m}$.

Результаты расчетов для гетерогенного слоистого образца, в котором исключены “вакуумные” слои, свидетельствуют о незначительной зависимости профилей от порядка чередования вольфрамовых и медных слоев. Профили температуры для образца, состоящего из монолитных слоев, приведены на рис. 4, *б*. Видно, что осциллирующий характер профилей температуры сохраняется. Главное различие профилей, приведенных на рис. 4, *a, б*, заключается в различии установившихся значений температуры для медных слоев: установившееся значение температуры медных слоев T_{γ} в “пористом” образце приблизительно на 1000 К больше, чем в монолитном.

Изменение состояния вольфрамовых и медных слоев в термодинамических координатах можно вычислить, исключая время из соответствующих зависимостей. Например, путем исключения времени из профилей давления (см. рис. 2, *a*) и профилей температуры (см. рис. 4, *a*) получены фазовые траектории вольфрамового и соседнего медного слоев в координатах давление — температура. Эти фазовые траектории приведены на рис. 5. Видно, что рассматриваемая модель позволяет рассчитывать температуры отдельных компонентов материала.

Рассмотрим некоторые особенности поведения градиентных смесей, которые учитываются в предлагаемой модели и не учитываются в моделях, использующих средневзвешенные характеристики компонентов смеси. На рис. 2, 4 видно, что в каждой частице смеси происходят знакопеременные (относительно установившихся значений) колебания давления, температуры и объема. При этом рассматриваемая модель позволяет получить не только качественные, но и количественные характеристики нагружаемого материала. Так, максимальная амплитуда колебаний давления в частице (см. рис. 5) приблизительно равна 50 ГПа, что составляет примерно 30 % невозмущенного давления (150 ГПа) однократного ударного сжатия, которое используется в моделях, основанных на средневзвешенных характеристиках смеси.

Следует отметить, что в уравнениях состояния (см. п. 3) не учитываются прочностные свойства материалов. Поэтому рассматриваемая модель градиентной смеси применима для области высоких давлений ударного сжатия, превышающих динамические пределы упругости компонентов смеси.

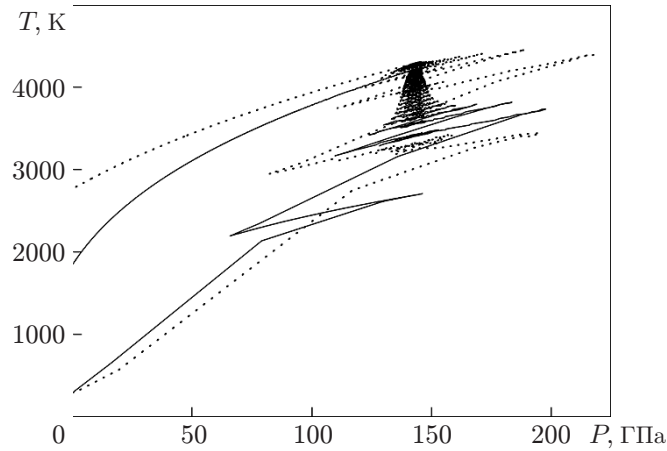


Рис. 5. Фазовые траектории вольфрамового (пунктирная линия) и соседнего медного (сплошная линия) слоев в координатах давление — температура при $N = 50$, $n = 7$, $W_0 = 3,5$ км/с

3. Уравнения состояния меди, вольфрама и расчет термодинамических параметров ударного сжатия. Полуэмпирическое приближение (см. [10]) для фоновой части свободной энергии твердого тела $F = F(V, T)$ (V — удельный объем материала, T — его температура) базируется на модели эйнштейновских осцилляторов:

$$F = E_x + 3R \left[\frac{\Theta}{2} + T \ln \left(1 - \exp \left(- \frac{\Theta}{T} \right) \right) \right]; \quad (1)$$

$$\Theta = \Theta_0 \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_0} \right)^2 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3}; \quad (2)$$

$$v_0 = V_0 \left(1 + \frac{2}{\gamma_0 - 2/3} \right),$$

где R — удельная газовая постоянная; $\Theta = \Theta(V)$ — характеристическая температура; $\Theta_0 = \Theta(V_0)$; $\gamma_0 = \gamma_0(V_0, T_0)$ — параметр Грюнайзена; V_0 — начальный объем однородного монолитного материала; T_0 — начальная температура.

Единственный подгоночный параметр модели v_x входит в выражение для потенциальной энергии $E_x = E_x(V)$

$$E_x = -v_x(C_1 H_x + C_2 x) + C_3; \quad (3)$$

$$H_x = 9 \left(\frac{1}{10} x^{-2/3} + 2x^{1/3} + \frac{3}{2} x^{4/3} - \frac{1}{7} x^{7/3} + \frac{1}{70} x^{10/3} \right), \quad x = \frac{V}{v_x},$$

где C_1, C_2, C_3 — константы, выраженные через параметр v_x с использованием справочных данных для рассматриваемого материала.

Согласно термодинамическим тождествам уравнения состояния определяются частными производными свободной энергии (1). Так, термическое уравнение состояния $P = P(V, T) = -\partial F / \partial V$, т. е. зависимость давления P от объема и температуры имеет вид

$$P = P_x + 3R \frac{\gamma G}{V} \Theta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta/T) - 1} \right), \quad (4)$$

где $P_x = P_x(V)$ — потенциальное давление:

$$P_x = 3C_1 \left(-\frac{1}{5} x^{-5/3} + 2x^{-2/3} + 6x^{1/3} - x^{4/3} + \frac{1}{7} x^{7/3} \right) + C_2,$$

Коэффициенты полуэмпирического выражения (1) свободной энергии меди и вольфрама

Материал	T_0 , К	V_0 , см ³ /моль	Θ_0 , К	v_0 , см ³ /моль	v_x , см ³ /моль	C_1 , ГПа	C_2 , ГПа	C_3 , кДж/г
Cu	300	7,114	256,50	17,785	14,648	-569,179	11833,489	-1369,093
W	300	9,491	287,25	28,410	26,801	-313,876	6471,738	-480,500

$\gamma_G = \gamma_G(V)$ — объемная зависимость коэффициента Грюнайзена:

$$\gamma_G = -\frac{\partial \ln \Theta}{\partial \ln V} = \frac{2}{3} + \frac{2V}{v_0 - V}. \quad (5)$$

Давление P_h , энергия E_h и температура T_h при заданном объеме V_h материала, сжатого одномерной ударной волной, вычисляются в результате решения системы трех уравнений

$$P_h = P_x + 3R\Theta \frac{\gamma_G}{V_h} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta/T_h) - 1} \right); \quad (6)$$

$$E_h = E_0 + (P_h + P_0)(V_{00} - V_h)/2; \quad (7)$$

$$T_h = \Theta / \ln(1 + F_E), \quad (8)$$

где $F_E = ((E_h - E_x)/(3R\Theta) - 1/2)^{-1}$. Уравнение (6) является термическим уравнением состояния (4), уравнение (7) представляет собой закон сохранения энергии на ударном фронте, для получения уравнения (8) используются соотношения (2), (4). Система (6)–(8) решается методом итераций. На первом шаге итераций $T_h = T_0$. Величина E_0 для уравнения (7) находится из соотношения $E_0 = E(V_0, T_0)$ с помощью калорического уравнения состояния

$$E = E_x + V(P - P_x)/\gamma_G,$$

где γ_G — объемная зависимость коэффициента Грюнайзена (5).

Величина подгоночного параметра v_x для меди и вольфрама находилась из условия наилучшего соответствия между ударной адиабатой $P_h = P(V_h)$, рассчитываемой по формуле (6), и экспериментальной ударной адиабатой для монолитного материала [12]. Коэффициенты из уравнения (1) для меди и вольфрама представлены в таблице. Как отмечалось выше, расчет кинематических и термодинамических параметров модельного образца (см. рис. 1) проводился в рамках специально разработанного алгоритма.

4. Выводы. Разработана численная пластинчатая модель для пористых градиентных материалов, предназначенная для расчета термодинамических (давления, температуры, энергии и др.) и кинематических (массовой скорости) параметров монолитных компонентов матрицы и наполнителей пористого градиентного материала при сильном одномерном ударном сжатии. Результаты расчетов по модели согласуются с результатами измерения массовой скорости и давления при ударно-волновом нагружении реального медно-вольфрамового пористого материала в диапазоне давлений ударного сжатия $20 \div 150$ ГПа и позволяют рассчитывать изменение термодинамических параметров для каждого компонента пористого градиентного материала, а также состояния давление — массовая скорость образца в целом. Модель можно использовать для прогнозирования термомеханического поведения пористых слоистых градиентных смесей при сильном ударном сжатии.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Дремин А. Н., Карпухин И. А.** Метод определения ударных адиабат дисперсных веществ // ПМТФ. 1960. № 3. С. 184–188.
2. **Подурец М. А., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф.** Ударная сжимаемость кварца в смеси с алюминием // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1968. № 4. С. 28–32.
3. **Мак-Куин Р., Марш С., Тейлор Дж. и др.** Уравнение состояния твердых тел по результатам исследований ударных волн // Высокоскоростные ударные явления. М.: Мир, 1970. С. 299–427.
4. **Николаевский В. Н.** Гидродинамический анализ ударных адиабат гетерогенных смесей веществ // ПМТФ. 1969. № 3. С. 82–88.
5. **Герасимов А. В., Кректулева Р. А.** Численное моделирование деформирования и разрушения функционально градиентных пористых материалов при взрывном и ударном нагружении // Механика композиц. материалов и конструкций. 1999. Т. 5, № 3. С. 94–106.
6. **Jordan J. L., Herbold E. B., Sutherland G., et al.** Shock equation of state of multi-constituent epoxy-metal particulate composites // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. 013531.
7. **Huang L., Han W. Z., An Q., et al.** Shock-induced consolidation and spallation of Cu nanopowders // J. Appl. Phys. 2012. V. 111. 013508.
8. **Thouvenin P. J.** Action d'une onde de choc sur un solide poreux // J. Physique. 1966. V. 27, N 2. P. 183–189.
9. **Ким В. В.** Численное моделирование газодинамических процессов при высоких плотностях энергии модифицированным методом индивидуальных частиц: Дис. . . канд. физ.-мат. наук. Черноголовка, 2005.
10. **Molodets A. M.** Thermodynamic potentials and non-monotonic melting curve of sodium at high pressure // High Pressure Res. 2010. V. 30, N 2. P. 325–331.
11. **Зельдович Я. Б.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений / Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. М.: Наука, 1966.
12. **LASL Shock Hugoniot Data** / Ed. by S. P. Marsh. Berkeley: Univ. California Press, 1980.

*Поступила в редакцию 13/1 2014 г.,
в окончательном варианте — 18/VI 2014 г.*
