

Уравнение состояния гидрида кальция при ударном сжатии

К. В. Хищенко^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

² Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский пер., 9, Долгопрудный 141701, Россия

E-mail: konst@ihed.ras.ru

Статья поступила в редакцию 28 ноября 2018 г.

Аннотация. Предлагается уравнение состояния гидрида кальция $\text{CaH}_{1.9}$ в широком диапазоне плотностей, давлений и удельных внутренних энергий. Рассчитана ударная адиабата этого материала и проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Предложенное уравнение состояния может быть эффективно использовано при численном моделировании ударно-волновых процессов в этом веществе. <https://doi.org/10.33849/2018120>

1. ВВЕДЕНИЕ

Для численного моделирования различных физических процессов путем решения системы уравнений гидродинамики требуется знание уравнения состояния среды во всем диапазоне реализуемых параметров [1–3]. Для таких процессов как взаимодействие интенсивного лазерного излучения [4–8] или пучков частиц высокой энергии [9–12] с конденсированным веществом, быстрый нагрев проводников мощными импульсами электрического тока [13–18], высокоскоростное соударение тел [19–21], характерна широкая область изменения давлений и удельных внутренних энергий от наблюдаемых при нормальных условиях до экстремально высоких значений. Корректность уравнения состояния во многом определяет адекватность результатов численного моделирования [22–24].

Гидриды представляют собой класс химических соединений, обладающих интересными свойствами, благодаря которым эти материалы находят применение, в частности, в ядерной технике [25]. Гидриды могут образовываться при использовании металлов в среде с содержанием водорода [26], меняя тем самым свойства исходного вещества. В этой связи развитие моделей термодинамических свойств гидридов металлов является востребованным [27].

В настоящей работе предлагается уравнение состояния гидрида кальция $\text{CaH}_{1.9}$ в рамках простой полуэмпирической модели [28–31], применимой в широком диапазоне удельных объемов ($V = \rho^{-1}$, где ρ — плотность), давлений (P) и удельных внутренних энергий (E). Хотя функция $E(P, V)$ не содержит полную информацию обо всех термодинамических потенциалах и их производных, тем не менее, ее знания достаточно для моделирования адиабатических процессов [32–34]. Далее приведено описание модели уравнения состояния и показаны результаты расчетов для гидрида кальция в сравнении с имеющимися данными ударно-волновых экспериментов.

2. МОДЕЛЬ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

В выбранной модели взаимосвязь давления, объема и внутренней энергии задается в форме аналитической функции

$$P(V, E) = P_c(V) + \frac{\Gamma(V, E)}{V} [E - E_c(V)], \quad (1)$$

в которой E_c — энергия на изотерме нулевой температуры $T = 0$ (на холодной кривой); $P_c = -dE_c/dV$ — соответствующее давление при $T = 0$; коэффициент Γ определяет вклад теплового движения частиц в уравнение состояния.

Зависимость энергии от объема на холодной кривой задается полиномом [35–38]

$$E_c(V) = \frac{B_{0c}V_{0c}}{m-n} \left(\frac{\sigma_c^m}{m} - \frac{\sigma_c^n}{n} \right) + E_{\text{sub}}, \quad (2)$$

где $\sigma_c = V_{0c}/V$; V_{0c} и B_{0c} — удельный объем и модуль сжатия при $P = 0$ и $T = 0$; E_{sub} — энергия сублимации вещества, которая определяется из условия нормировки

$$E_c(V_{0c}) = 0, \quad (3)$$

из которого можно получить

$$E_{\text{sub}} = \frac{B_{0c}V_{0c}}{mn}. \quad (4)$$

Зависимость коэффициента Γ выбрана в виде [28]

$$\Gamma(V, E) = \gamma_i + \frac{\gamma_c(V) - \gamma_i}{1 + \sigma^{-2/3} [E - E_c(V)] / E_a}, \quad (5)$$

где $\sigma = V_0/V$, а V_0 — удельный объем при нормальных условиях $P = P_0 = 0.1$ МПа, $E = E_0$. При малых тепловых энергиях $E - E_c \ll E_a \sigma^{2/3}$ уравнение (5) дает $\Gamma \approx \gamma_c(V)$; в противоположном случае $E - E_c \gg E_a \sigma^{2/3}$, коэффициент Γ приближается к постоянному значению γ_i . Энергия перехода от одного предельного случая к другому E_a определяется на основании сравнения с результатами экспериментов с сильными ударными волнами. Функция $\gamma_c(V)$ взята в форме [39–41]

$$\gamma_c(V) = 2/3 + (\gamma_{0c} - 2/3) \frac{\sigma_n^2 + \ln^2 \sigma_m}{\sigma_n^2 + \ln^2(\sigma/\sigma_m)}, \quad (6)$$

в которой параметры σ_n и σ_m обычно находятся из условия оптимального описания ударно-волновых данных,

$$\gamma_{0c} = \gamma_i + (\gamma_0 - \gamma_i) \left[1 + \frac{E_0 - E_c(V_0)}{E_a} \right]^2, \quad (7)$$

γ_0 — коэффициент Грюнайзена $\gamma = V(\partial P/\partial E)_V$ при нормальных условиях, $\gamma(V_0, E_0) = \gamma_0$.

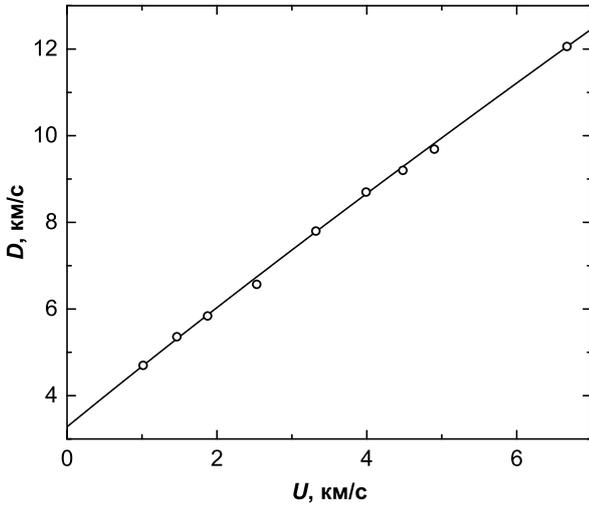


Рисунок 1. Ударная адиабата гидрида кальция $\text{CaH}_{1.9}$: линия — расчет по уравнению состояния этой работы; маркеры — экспериментальные данные [44].

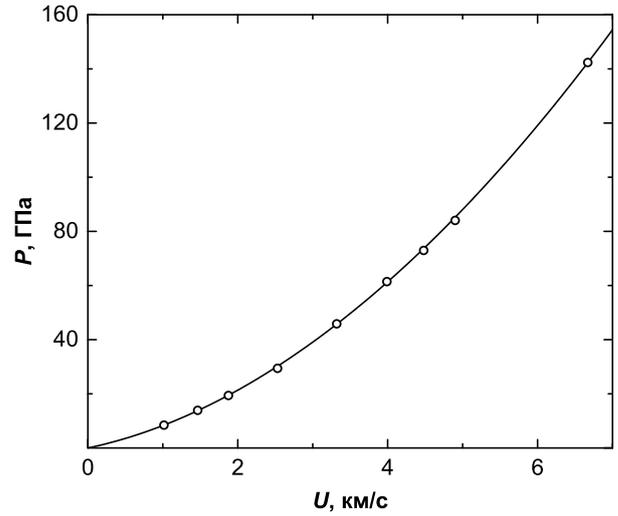


Рисунок 2. Ударная адиабата гидрида кальция $\text{CaH}_{1.9}$: обозначения аналогичны рисунку 1.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

При $P = P_0$ гидрид кальция CaH_2 имеет орторомбическую структуру [42]. Изотермическое сжатие CaH_2 при комнатной температуре до $P \approx 15\text{--}20$ ГПа ведет к образованию фазы с гексагональной структурой [43].

Ударная сжимаемость гидрида кальция изучена до давления 142 ГПа с помощью традиционных взрывных систем [44]; при этом химический состав исследованных образцов определен как $\text{CaH}_{1.9}$.

В настоящей работе экспериментальные данные [44] обобщены в рамках модели (1)–(7); коэффициенты для $\text{CaH}_{1.9}$ получены следующие: $V_0 = 0.56497 \text{ см}^3/\text{г}$, $V_{0c} = 0.557 \text{ см}^3/\text{г}$, $B_{0c} = 19.84097 \text{ ГПа}$, $m = 1$, $n = 1.68$, $\sigma_m = 0.8$, $\sigma_n = 1$, $\gamma_{0c} = 0.9$, $\gamma_i = 0.45$, $E_a = 20 \text{ кДж/г}$.

Для сравнения с результатами ударно-волновых измерений была рассчитана адиабата Гюгонио образцов $\text{CaH}_{1.9}$ с начальной плотностью $\rho_0 = V_0^{-1} = 1.77 \text{ г/см}^3$. Состояния на этой ударной адиабате определялись путем решения системы, состоящей из уравнения сохранения энергии во фронте ударной волны [1],

$$E = E_0 + \frac{1}{2}(P_0 + P)(V_0 - V), \quad (8)$$

и уравнения состояния $E = E(P, V)$. При фиксированном значении давления и удельного объема в точке на ударной адиабате скорость фронта ударной волны (D) и скорость вещества за фронтом (U) находится из законов сохранения массы и импульса [1]:

$$D = V_0 \sqrt{(P - P_0)/(V_0 - V)}, \quad (9)$$

$$U = \sqrt{(P - P_0)(V_0 - V)}. \quad (10)$$

Результаты расчета ударной адиабаты $\text{CaH}_{1.9}$ в сопоставлении с данными экспериментов [44] показаны на рисунках 1–3. Из анализа рисунков 1–3 можно сделать вывод, что полученное уравнение состояния гидрида кальция с хорошей точностью согласуется с имеющимися данными во всем исследованном диапазоне скоростей, давлений и степеней сжатия.

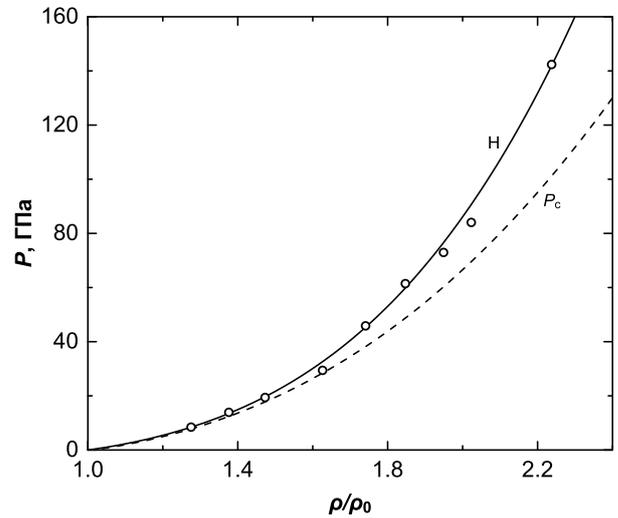


Рисунок 3. Ударная адиабата (H) и холодная кривая (P_c) гидрида кальция $\text{CaH}_{1.9}$: линии — расчет этой работы; маркеры — экспериментальные данные [44].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработано уравнение состояния гидрида кальция $\text{CaH}_{1.9}$, которое оптимальным образом обобщает имеющиеся данные по ударной сжимаемости этого материала в широком диапазоне плотностей, давлений и внутренних энергий. Это уравнение состояния может быть эффективно использовано при численном моделировании различных процессов при высоких плотностях энергии.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-08-01493).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я Б и Райзер Ю П 1966 *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений* (Москва: Наука)

2. Бушман А В, Канель Г И, Ни А Л и Фортов В Е 1988 *Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий* (Черноголовка: ИХФ АН СССР)
3. Фортов В Е 2013 *Физика высоких плотностей энергии* (Москва: ФИЗМАТЛИТ)
4. Veysman M E, Agranat M B, Andreev N E, Ashitkov S I, Fortov V E, Khishchenko K V, Kostenko O F, Levashov P R, Ovchinnikov A V and Sitnikov D S 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 125704
5. Povarnitsyn M E, Itina T E, Khishchenko K V and Levashov P R 2011 *Appl. Surf. Sci.* **257** 5168–5171
6. Inogamov N A, Petrov Yu V, Zhakhovsky V V, Khokhlov V A, Demaske B J, Ashitkov S I, Khishchenko K V, Migdal K P, Agranat M B, Anisimov S I, Fortov V E and Oleynik I I 2012 *AIP Conf. Proc.* **1464** 593–608
7. Inogamov N A, Zhakhovsky V V, Petrov Yu V, Khokhlov V A, Ashitkov S I, Khishchenko K V, Migdal K P, Initsky D K, Emirov Yu N, Komarov P S, Shepelev V V, Miller C W, Oleynik I I, Agranat M B, Andriyash A V, Anisimov S I and Fortov V E 2013 *Contrib. Plasma Phys.* **53** 796–810
8. Krasyuk I K, Pashinin P P, Semenov A Yu, Khishchenko K V and Fortov V E 2016 *Laser Phys.* **26** 094001
9. Kurilenkov Yu K, Skowronek M and Dufty J 2006 *J. Phys. A: Math. Gen.* **39** 4375–4386
10. Gnyusov S F, Rotshtein V P, Mayer A E, Rostov V V, Gunin A V, Khishchenko K V and Levashov P R 2016 *Int. J. Fract.* **199** 59–70
11. Фролова А А, Хищенко К В и Чарахчян А А 2016 *ЖВММФ* **56** 442–454
12. Kurilenkov Yu K, Gus'kov S Yu, Karpukhin V T, Oginov A V and Samoylov I S 2018 *J. Phys.: Conf. Ser.* **946** 012025
13. Rousskikh A G, Baksht R B, Chaikovskiy S A, Fedunin A V, Khishchenko K V, Labetsky A Yu, Levashov P R, Shishlov A V and Tkachenko S I 2006 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **34** 2232–2238
14. Орешкин В И, Хищенко К В, Левашов П Р, Русских А Г и Чайковский С А 2012 *ТВТ* **50** 625–637
15. Kondratyev A M, Korobenko V N and Rakhel A D 2016 *Carbon* **100** 537–539
16. Senchenko V N and Belikov R S 2018 *J. Phys.: Conf. Ser.* **946** 012105
17. Rososhek A, Efimov S, Tewari S V, Yanuka D, Khishchenko K and Krasik Ya E 2018 *Phys. Plasmas* **25** 062709
18. Barendolts S A, Mesyats V G, Oreshkin V I, Oreshkin E V, Khishchenko K V, Uimanov I V and Tsvetoukh M M 2018 *Phys. Rev. Accel. Beams* **21** 061004
19. Grabovskii E V, Alexandrov V V, Branitskii A V, Frolov I N, Gribov A N, Gritsuk A N, Mitrofanov K N, Laukhin Ya N, Oleinik G M, Sasorov P V, Shishlov A O and Tkachenko S I 2018 *J. Phys.: Conf. Ser.* **946** 012041
20. Popova T V, Mayer A E and Khishchenko K V 2018 *J. Appl. Phys.* **123** 235902
21. Mintsev V B, Shilkin N S, Ternovoi V Ya, Nikolaev D N, Yuriev D S, Golubev A A, Kantsyrev A V, Skobliakov A V, Bogdanov A V, Varentsov D V and Hoffmann D H H 2018 *Contrib. Plasma Phys.* **58** 93–98
22. Бушман А В и Фортов В Е 1983 *УФН* **140** 177–232
23. Ломоносов И В и Фортова С В 2017 *ТВТ* **55** 596–626
24. Kadatskiy M A and Khishchenko K V 2018 *Phys. Plasmas* **25** 112701
25. Антонова М М 1965 *Свойства гидридов* (Киев: Наукова думка)
26. Антонова М М и Морозова Р А 1976 *Препаративная химия гидридов* (Киев: Наукова думка)
27. Голубков А Н, Гударенко Л Ф, Жерноклетов М В, Каякин А А и Шуйкин А Н 2017 *Физика горения и взрыва* **53**(3) 72–81
28. Хищенко К В, Жерноклетов М В, Ломоносов И В и Сутулов Ю Н 2005 *ЖТФ* **75**(2) 57–61
29. Khishchenko K V 2017 *Mathematica Montisnigri* **40** 140–147
30. Khishchenko K V 2018 *J. Phys.: Conf. Ser.* **946** 012082
31. Khishchenko K V 2018 *Mathematica Montisnigri* **41** 91–98
32. Povarnitsyn M E, Khishchenko K V and Levashov P R 2006 *Int. J. Impact Eng.* **33** 625–33
33. Абросимов С А, Бажулин А П, Воронов В В, Красюк И К, Пашиин П П, Семенов А Ю, Стучебрюхов И А, Хищенко К В и Черномырдин В И 2012 *ДАН* **442** 752–754
34. Rososhek A, Efimov S, Nitishinski M, Yanuka D, Tewari S V, Gurovich V Tz, Khishchenko K and Krasik Ya E 2017 *Phys. Plasmas* **24** 122705
35. Бушман А В, Жерноклетов М В, Ломоносов И В, Сутулов Ю Н, Фортов В Е и Хищенко К В 1993 *ДАН* **329** 581–584
36. Бушман А В, Жерноклетов М В, Ломоносов И В, Сутулов Ю Н, Фортов В Е и Хищенко К В 1993 *Письма в ЖЭТФ* **58** 640–644
37. Бушман А В, Ломоносов И В, Фортов В Е и Хищенко К В 1994 *Хим. физика* **13**(1) 64–81
38. Бушман А В, Ломоносов И В, Фортов В Е и Хищенко К В 1994 *Хим. физика* **13**(5) 97–106
39. Ломоносов И В, Фортов В Е и Хищенко К В 1995 *Хим. физика* **14**(1) 47–52
40. Khishchenko K V, Lomonosov I V and Fortov V E 1996 *AIP Conf. Proc.* **370** 125–128
41. Бушман А В, Жерноклетов М В, Ломоносов И В, Сутулов Ю Н, Фортов В Е и Хищенко К В 1996 *ЖЭТФ* **109** 1662–1670
42. Zintl E and Harder A 1935 *Z. Elektrochem. Angew. Phys. Chem.* **41** 33–52
43. Tse J S, Klug D D, Desgreniers S, Smith J S, Flacau R, Liu Z, Hu J, Chen N and Jiang D T 2007 *Phys. Rev. B* **75** 134108
44. Трунин Р Ф, Жерноклетов М В, Кузнецов Н Ф и Сутулов Ю Н 1987 *Изв. АН СССР. Физика Земли* (11) 65–70