



РФЯЦ-ВНИИЭФ
РОСАТОМ

Полуэмпирическое широкодиапазонное уравнение состояния меди в форме модели РОСА-МФИ

XVI «Забабахинские научные чтения»

Свойства веществ при высокоинтенсивных процессах

Арапов Илья Николаевич,

Каякин А.А., Данилов А.С., Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф.

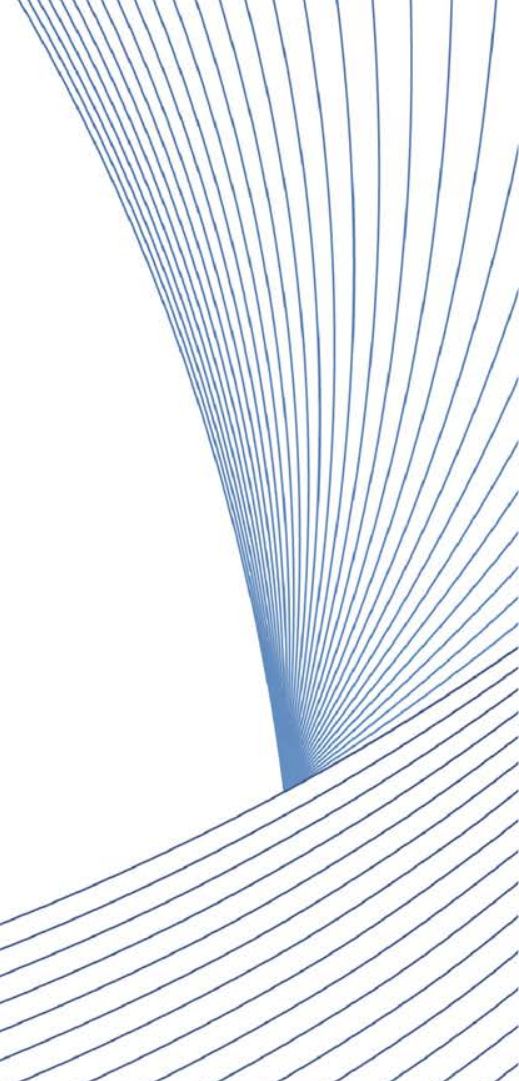
Описан вариант модификации аналитической полуэмпирической широкодиапазонной модели УРС РОСА-МИ [1-2]. Новая модель помимо описания фазового перехода жидкость - пар дополнена алгоритмами, позволяющими описывать термодинамические свойства вещества при переходе твердое тело – жидкость.

Эффективность модели проверена на примере разработки уравнения состояния одного из хорошо исследованных веществ – меди. В работе представлено сравнение данных экспериментов и расчетов по теоретическим моделям с расчетами по разработанному УРС.

Цель работы: провести модификацию модели широкодиапазонного УРС РОСА-МИ и разработать УРС меди.

1. Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф., Каякин А.А., Куделькин В.Г. // ФГВ. – 2013. – №1.
2. Каякин А.А., Гударенко Л.Ф., Гордеев Д.Г. // ФГВ. – 2014. –Т. 50, №5.

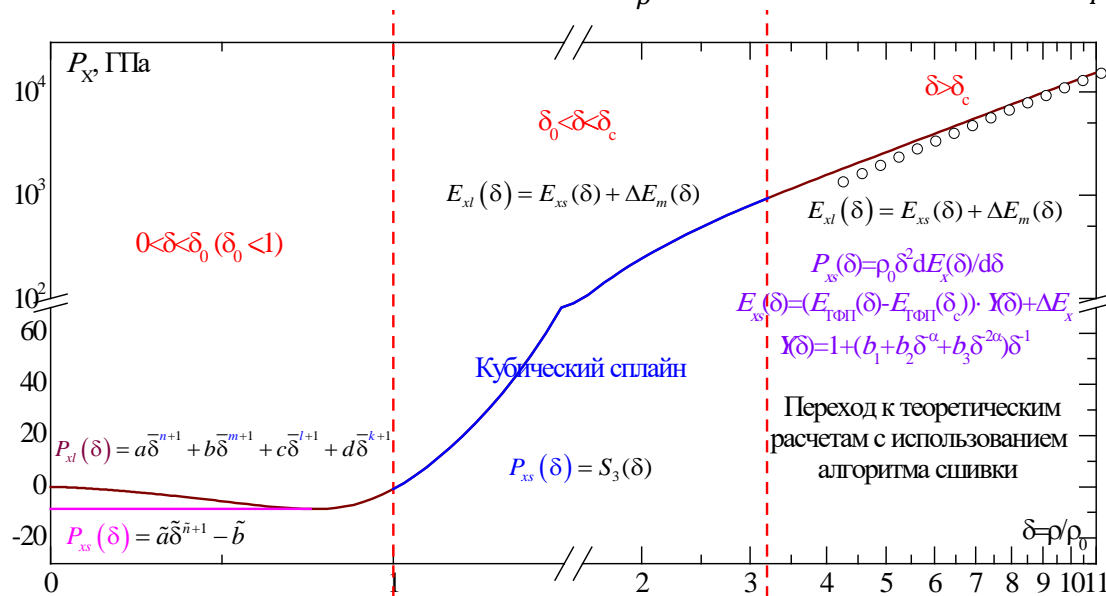
Модель РОСА-МФИ



Модель РОСА-МФИ

УРС твердого тела	УРС жидкости
$F_s(\delta, T) = E_{xs}(\delta) + F_{ps}(\delta, T) + F_e(\delta, T) + F_f(\delta, T)$	$F_l(\delta, T) = E_{xl}(\delta) + F_{pl}(\delta, T) + F_e(\delta, T) + F_f(\delta, T) - (\Delta S_V + \Delta S_N)T$

$$E(\rho, T) = F(\rho, T) - T \left(\frac{\partial F(\rho, T)}{\partial T} \right)_{\rho}; \quad P(\rho, T) = \rho^2 \left(\frac{\partial F(\rho, T)}{\partial \rho} \right)_{T}$$



Описание ионных составляющих

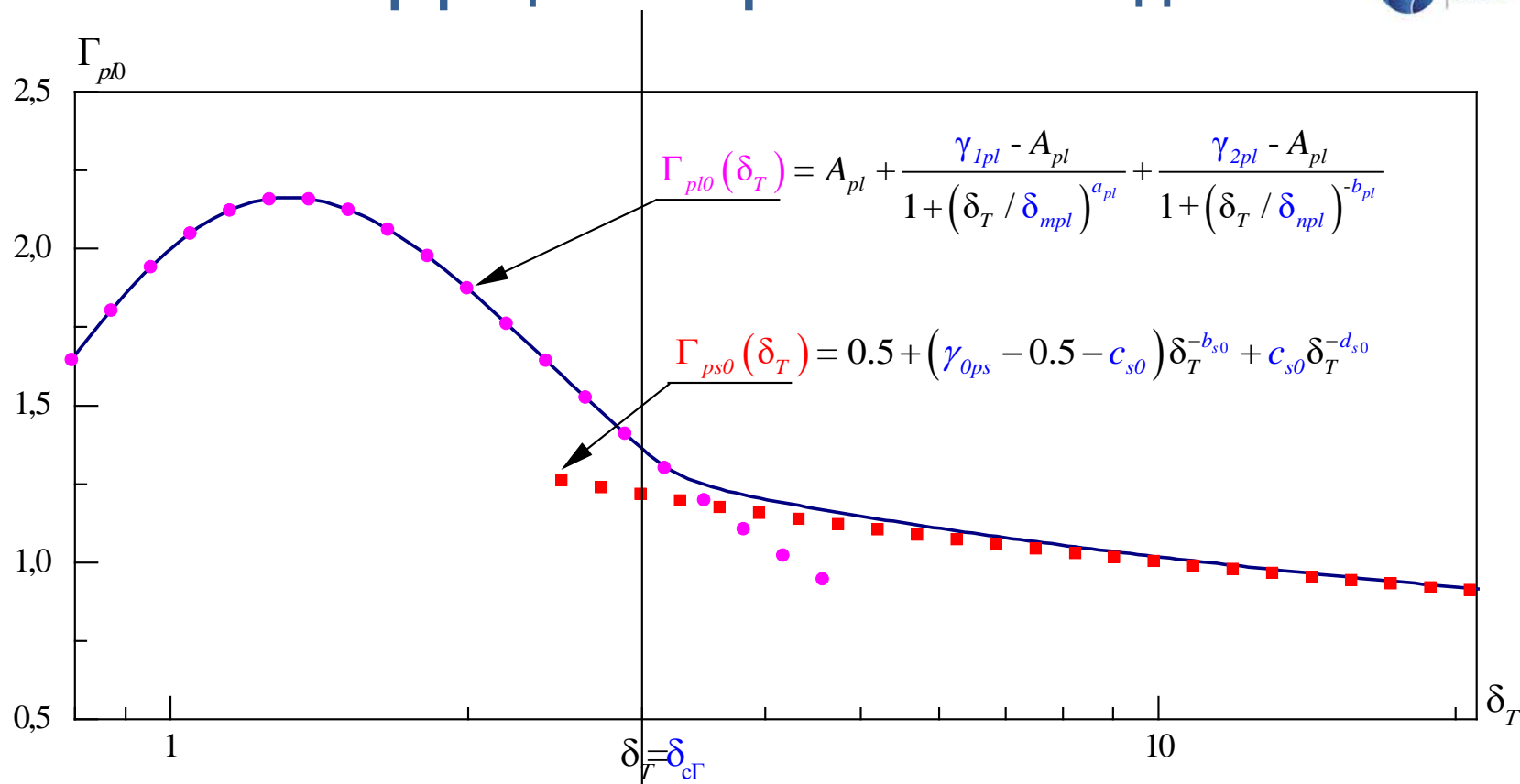
$$F_{ps}(\delta_T, T) = C_{v0} \cdot T \cdot \left\{ \alpha_D \cdot \left[\ln(1 - e^{-\theta_D \cdot z(\delta_T, T)}) - \frac{1}{3} D_3(\theta_D \cdot z(\delta_T, T)) \right] + (1 - \alpha_D) \cdot \ln[1 - e^{-\theta_E \cdot z(\delta_T, T)}] \right\};$$

$$D_3(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z \frac{t^3 dt}{e^t - 1}, \quad z(\delta_T, T) = \frac{\theta_{D0}(\delta_T)}{T}, \quad \theta_{D0}(\delta_T) = \exp\left(\int_1^{\delta_T} \Gamma_{ps0}(\tau) \frac{d\tau}{\tau}\right);$$

$$F_{pl}(\delta_T, T) = -\frac{C_{v0} \cdot T}{q} \cdot \left\{ -\gamma_\phi \cdot \ln \frac{\delta_T}{\delta_T^*} + q \cdot \ln \frac{T}{\Psi_{pl}(\delta_T^*)} + (1 - q) \cdot \ln \left[\frac{\Psi_{pl}(\delta_T) + T}{\Psi_{pl}(\delta_T^*)} \right] \right\};$$

$$\frac{d\Psi_{pl}(\delta_T)}{\Psi_{pl}(\delta_T)} = \frac{1}{q - 1} (q \cdot \Gamma_{plo}(\delta_T) - \gamma_\phi) \frac{d\delta_T}{\delta_T}; \quad q = \frac{2A \cdot C_{v0}}{3R}$$

Описание коэффициента Грюнайзена жидкости



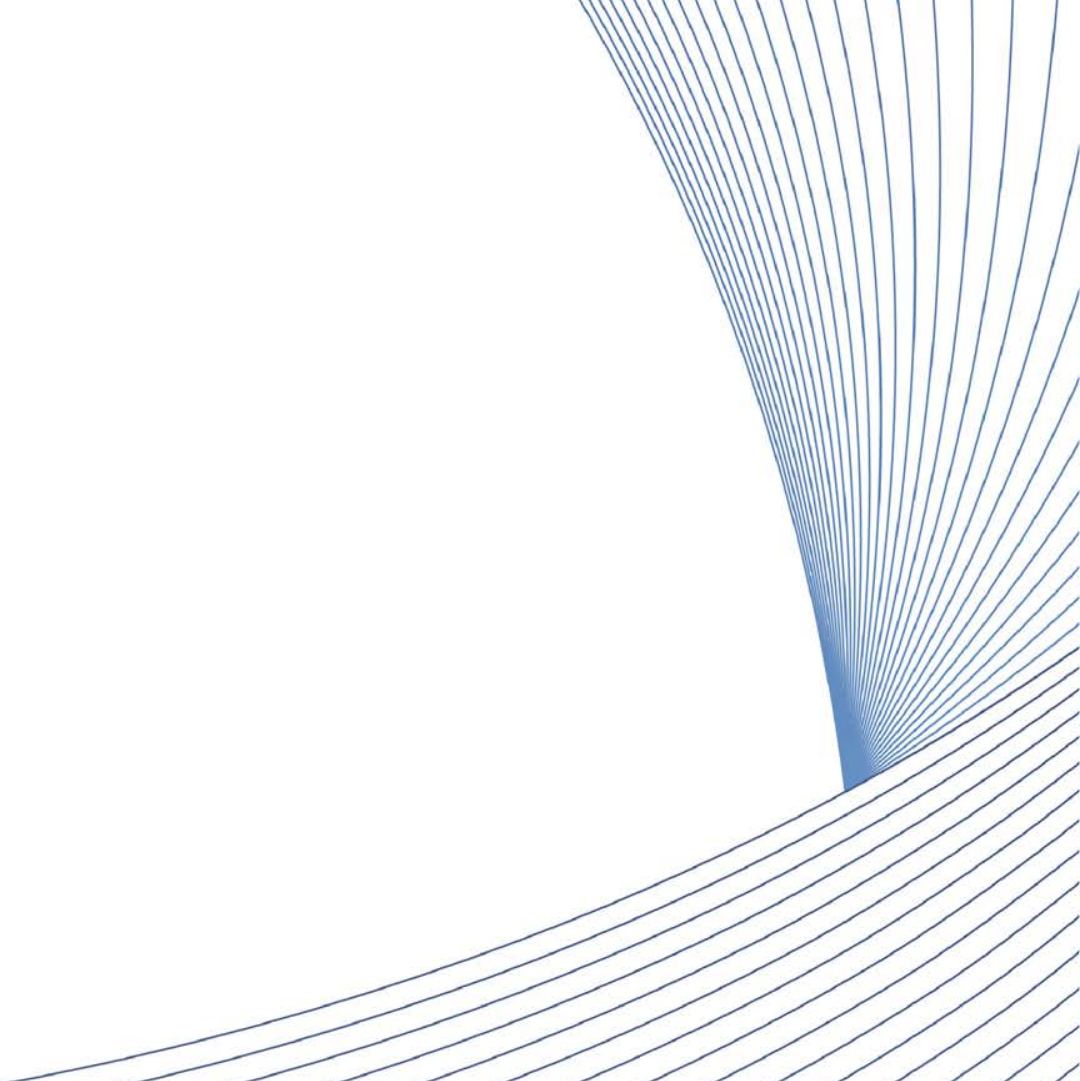
$$F_e(\delta_T, T) = -\frac{3R}{2A} \cdot T \cdot y(\delta_T, T) \cdot \ln \left[1 + \frac{\beta_0 AT}{3R \cdot (\delta_T \cdot y(\delta_T, T))^{\frac{2}{3}}} \right]$$

$$y(\delta_T, T) = Z - \left(Z - \left(Z_b - \frac{Z_b - Z_a}{1 + \left(\frac{\delta_T}{\delta_{ne}} \right)^{\alpha_e}} \right) \right) \cdot (g_1(T) \cdot (1 - \zeta(\delta_T)) + g_2(\delta_T, T) \cdot \zeta(\delta_T));$$

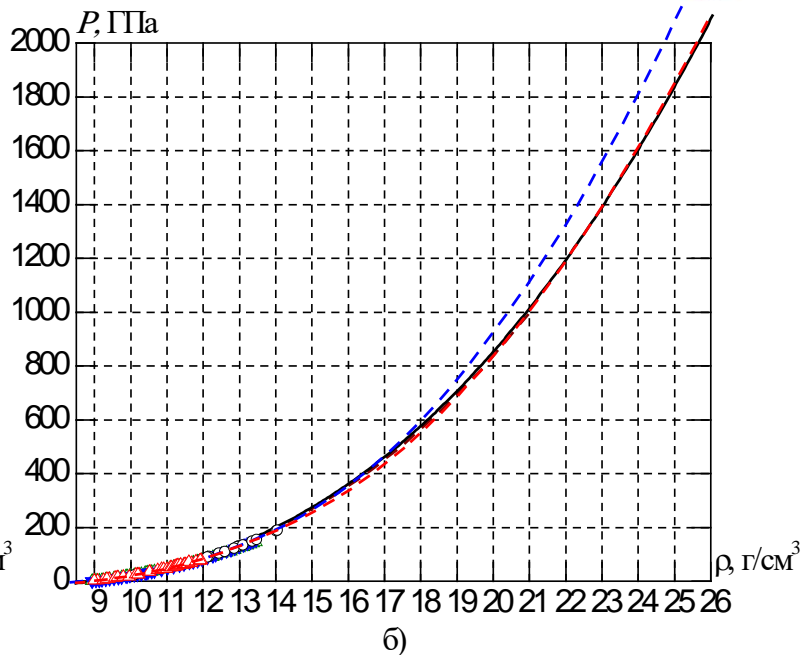
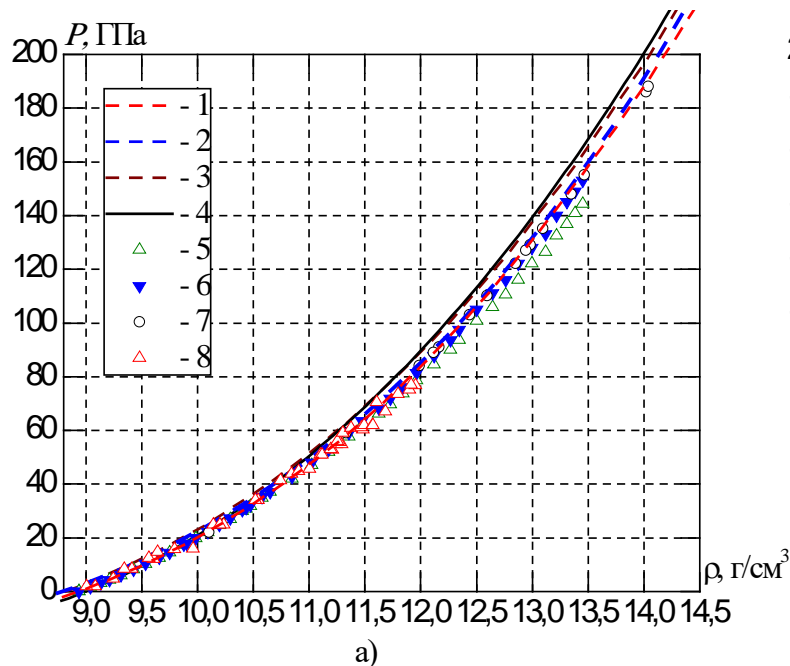
$$\zeta(\delta_T) = \frac{1}{a_\zeta + \left(\frac{\delta_T}{b_\zeta} \right)^{c_\zeta}}; \quad g_1(T) = e^{-\left(\frac{T}{\Psi_1} \right)^{\alpha_1}}; \quad g_2(\delta_T, T) = \frac{1}{1 + \left(\frac{T}{\Psi_2 (1 + a_\Psi \delta_T^{b_\Psi})} \right)^{\alpha_2}}$$

$$P_f(T) = \frac{\sigma \cdot T^4}{3}; \quad E_f(\rho, T) = \frac{\sigma \cdot T^4}{\rho}$$

УРС меди



Сравнение данных экспериментов и расчетов

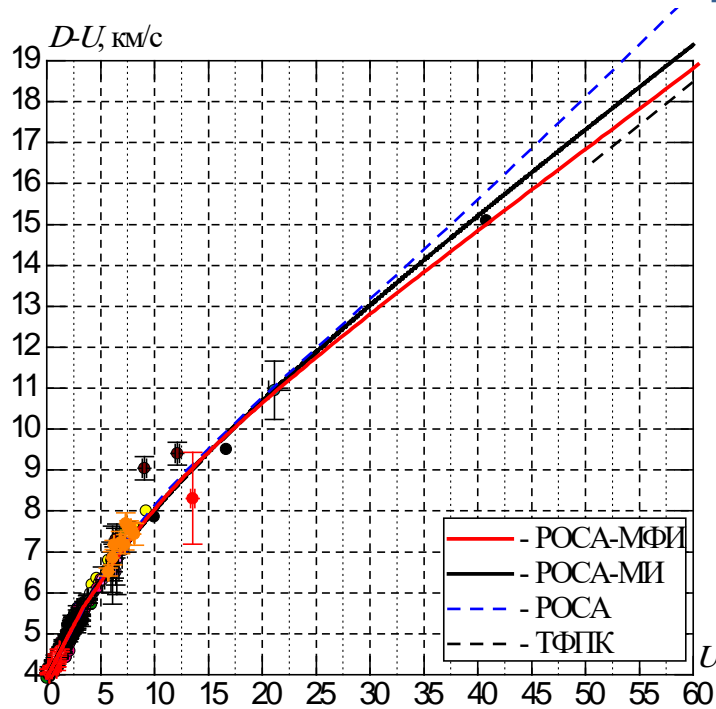


Расчет: 1 – РОСА-МФИ; 2 – РОСА; 3 – из работы [1]; 4 – МФП, расчет при $T=0$ К. Эксперимент: 5, 6 – [2]; 7 – [3]; 8 – [4].

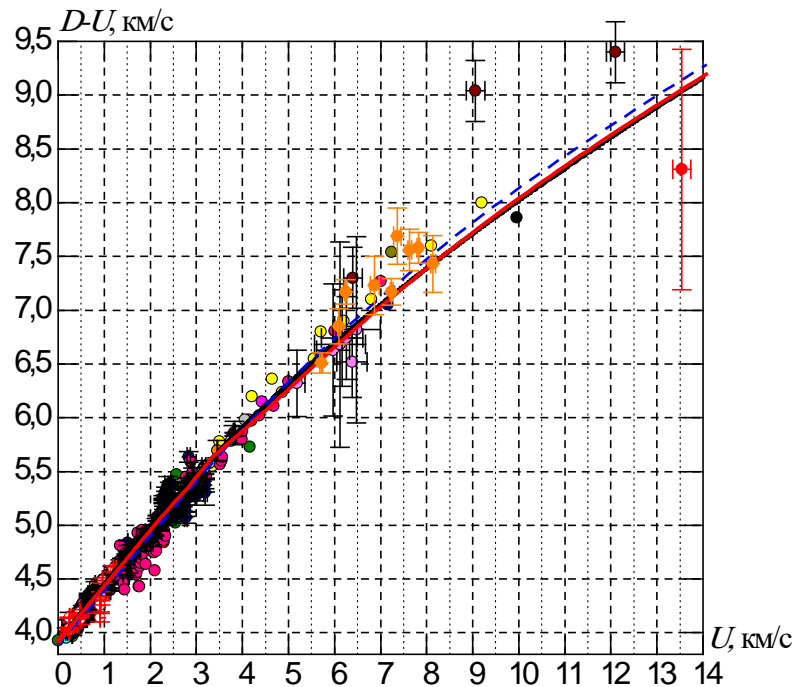
Зависимости давления от плотности на нулевой и нормальной изотермах меди

1. Wang Y., et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 84.
2. Dewaele A., et. al. // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 70.
3. Bell P.M., et. al. // Shock Waves in Condensed Matter. – 1985.
4. Xu J., et. al. // High Temperatures – High Pressures. – 1984. Vol. 16.

Сравнение данных экспериментов и расчетов



а)

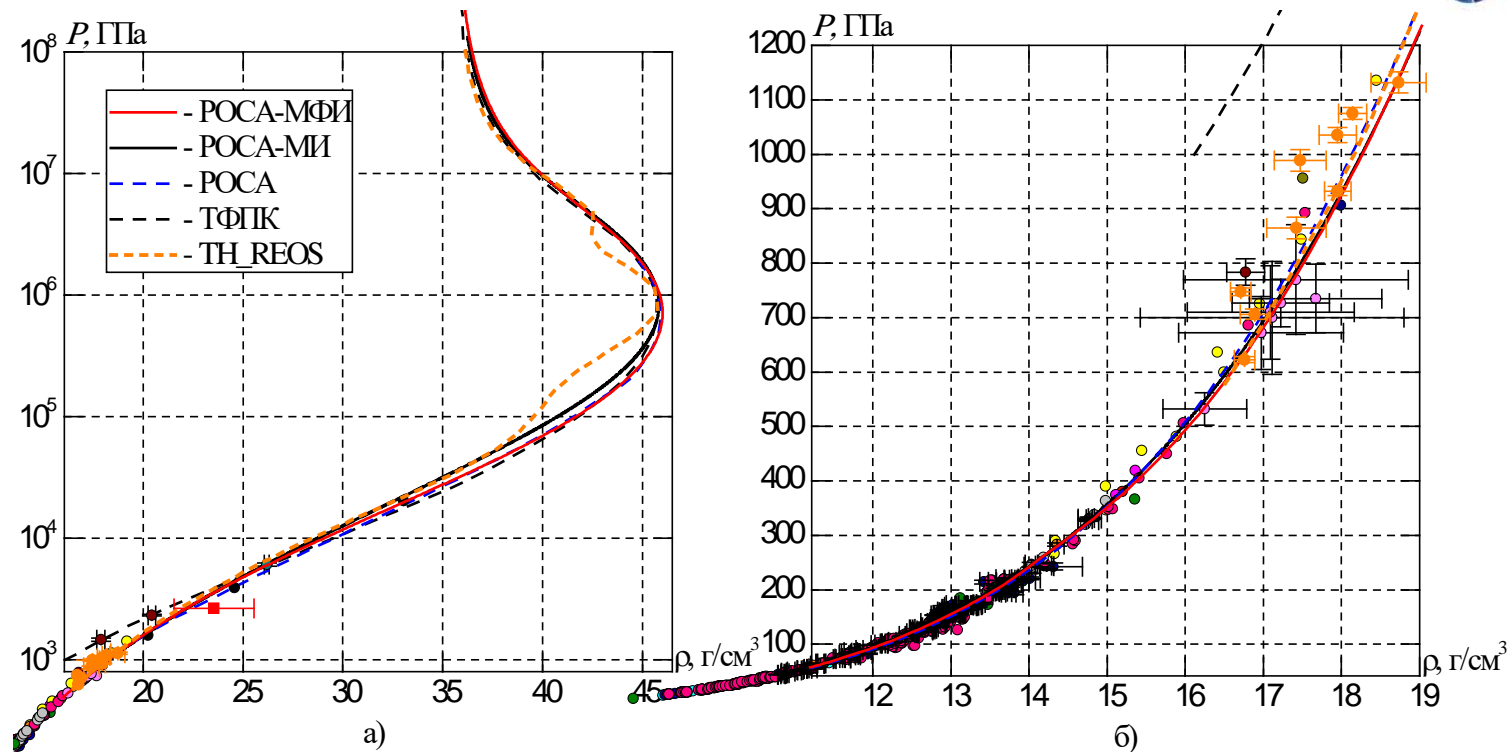


б)

Маркеры – эксперимент [1]

Зависимости разности волновой и массовой скоростей от массовой скорости на ударной адиабате меди, $\rho_0=8.93 \text{ г/см}^3$

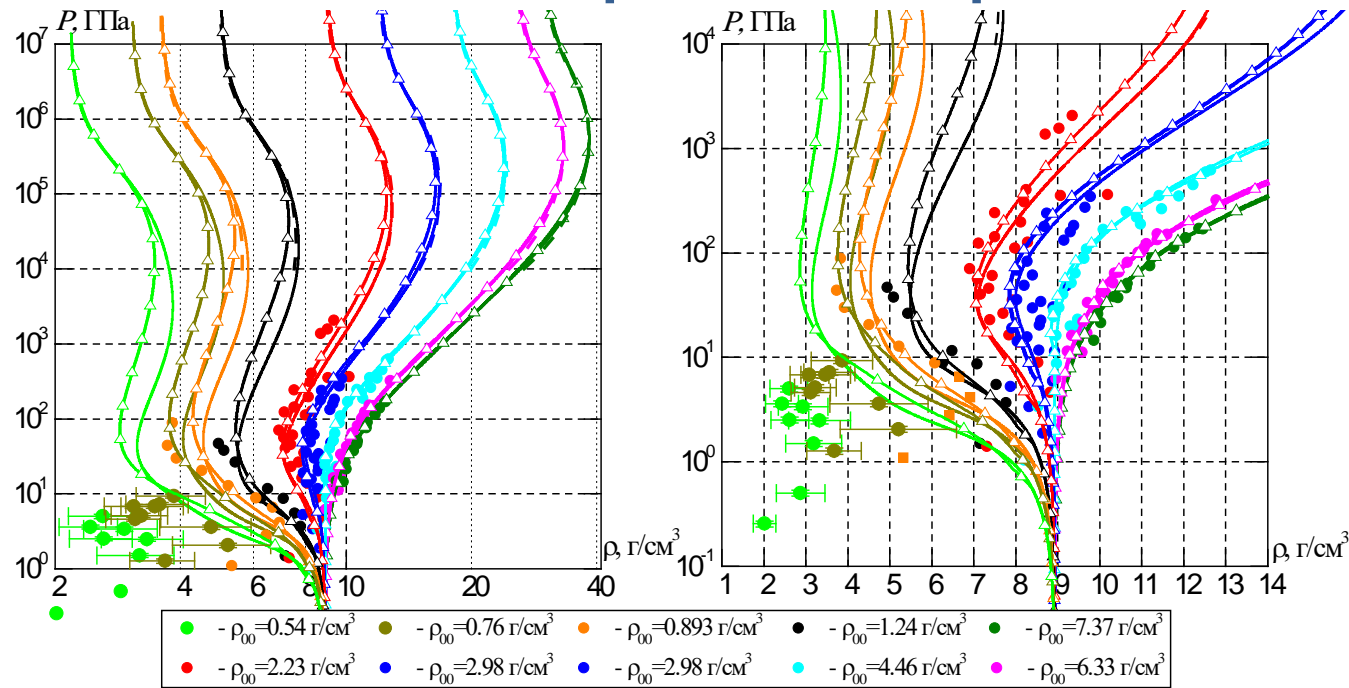
Сравнение данных экспериментов и расчетов



Маркеры – эксперимент [1]

Зависимости давления от плотности на ударной адиабате меди, $\rho_0=8.93 \text{ г/см}^3$

Сравнение данных экспериментов и расчетов

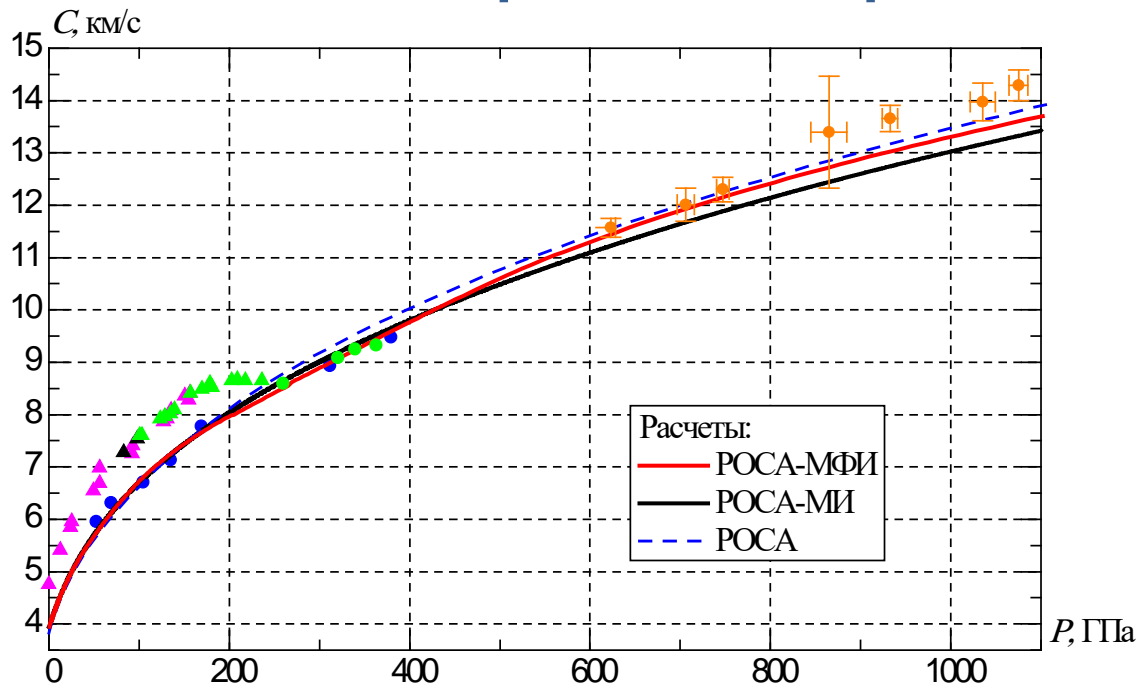


Линии: сплошные – РОСА-МИ; сплошные с треугольниками – РОСА-МФИ; штриховые - ТФПК.

Маркеры кружки – эксперимент [1], [2].

Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах пористой меди

Сравнение данных экспериментов и расчетов

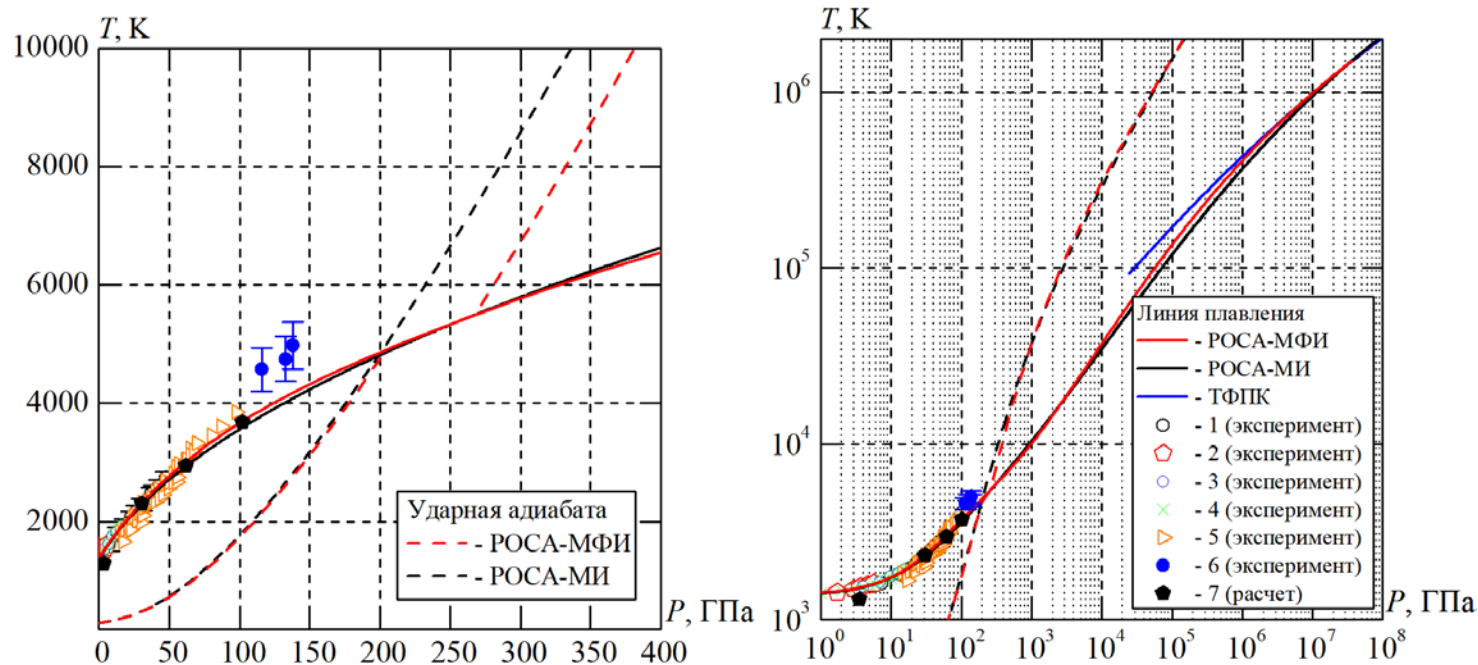


Маркеры – эксперименты [1-5]: круги – объемная, треугольники – продольная скорости звука.

Зависимости скорости звука в меди от давления за фронтом ударной волны

1. Голубкова Е.Ф. и др. Интерактивная справочная система пакета УРС-ОФ. // Сборник XVIII Международной конференции Супервычисления и математическое моделирование, 2022, (в печати).
2. Hayes D., et. al. // Shock Compression of Condensed Matter. – 1999.
3. Duffy T.S., et. al. // J. of Geophysical Research. – 1992. – Vol. 97.
4. Ke J., et. al. // Chin. J. of High Pressure Phys. – 2013. – Vol. 27
5. McCoy C.A., et. al. // Phys. Rev. B. – 2017. – Vol. 96.

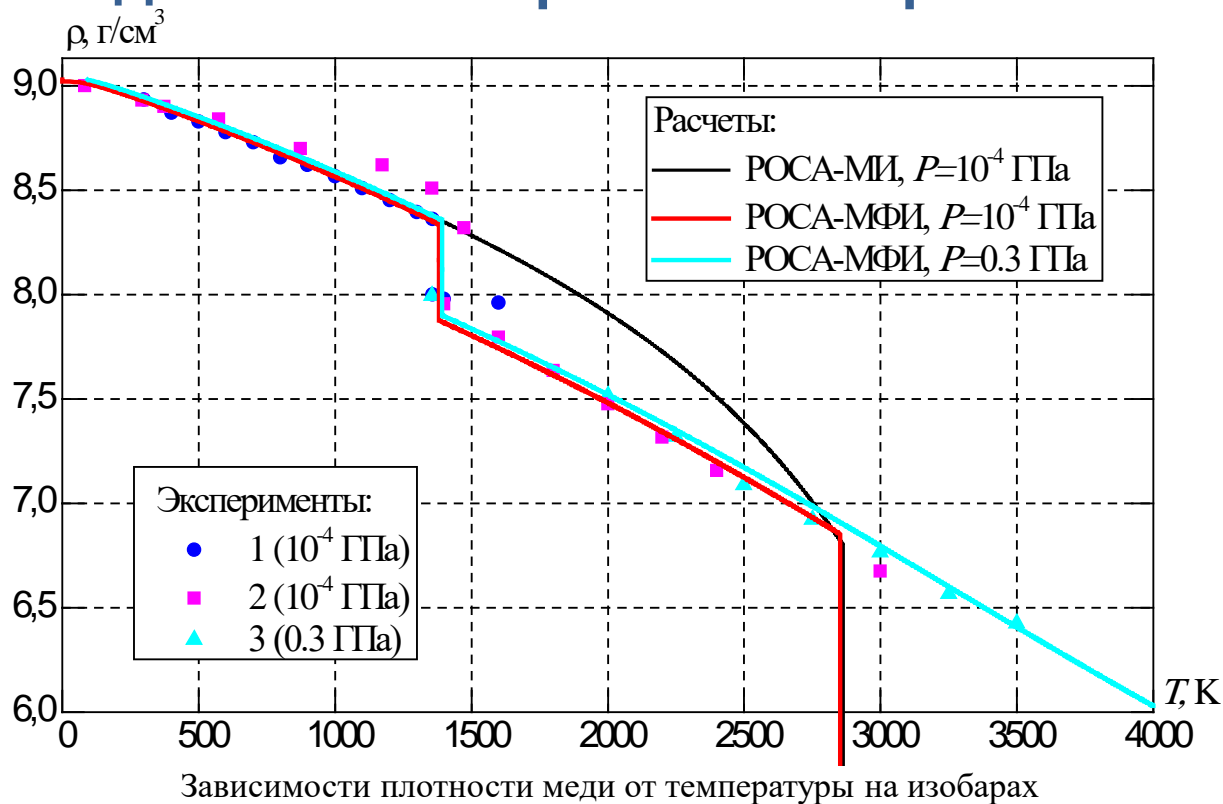
Сравнение данных экспериментов и расчетов



Зависимости температуры от давления на ударной адиабате и линии плавления меди

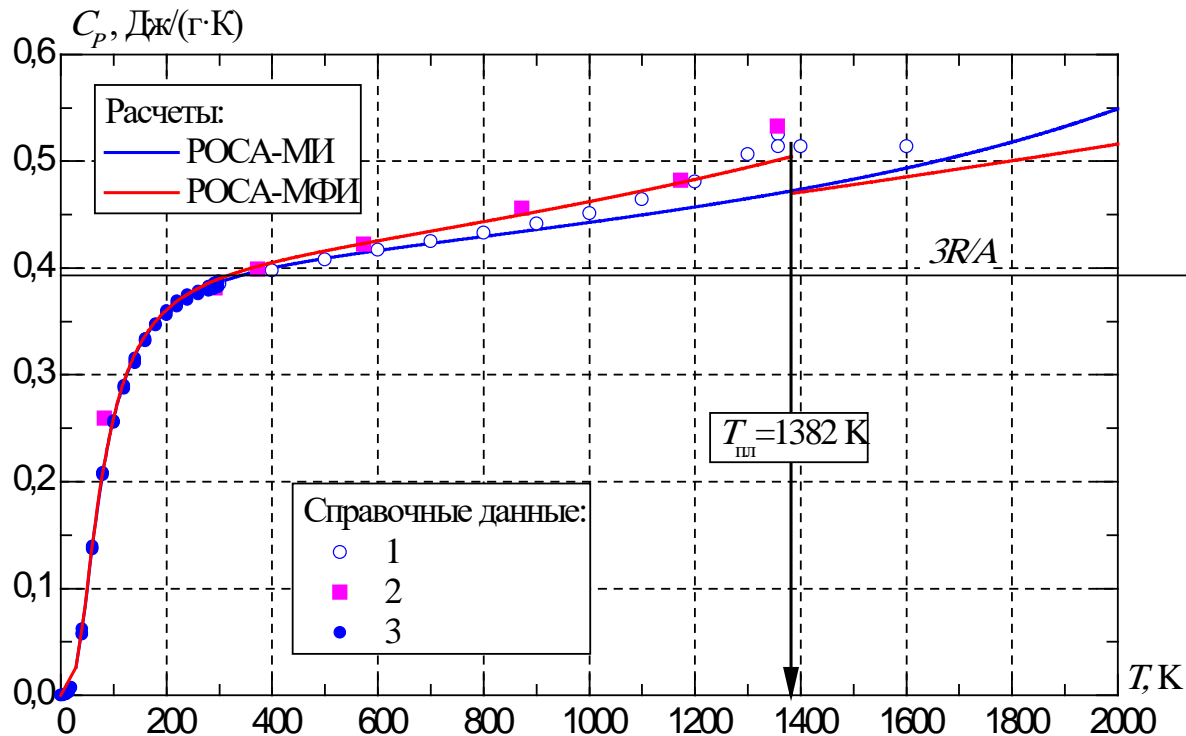
1. Errandonea D. // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 87.
2. Errandonea D. // J. of Appl. Phys. – 2010. – Vol. 108.
3. Brand H. et. al. // High Pressure Research – 2006. – Vol. 26.
4. Akella J. et. al. // J. of Geophysical Research – 1971. – Vol. 76.
5. Japel S. et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol. 95.
6. Tan H. et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 87.
7. Vočadlo L. et. al. // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 120.

Сравнение данных экспериментов и расчетов



1. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. 1989. 384 с.
2. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. 1968. 484 с.
3. Gathers G.R. // Int. J. of Thermophys. – 1983. – Vol. 4.

Сравнение данных экспериментов и расчетов



Зависимости теплоемкости от температуры на нормальной изобаре

1. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. 1989. 384 с.
2. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. 1968. 484 с.
3. Sandenaw T.A. // Heat capacity of copper below 300 K at test of two calorimeter design, 1959.



РФЯЦ-ВНИИЭФ
РОСАТОМ

Спасибо за внимание!

XVI «Забабахинские научные чтения»

Свойства веществ при высокоинтенсивных процессах

Арапов Илья Николаевич,

Каякин А.А., Данилов А.С., Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф.

29.05.2023