

# ЗНЧ-2023

## Уравнение состояния жидкой фазы тантала при высоких давлениях и температурах

Боярских К.А.<sup>1,2,3</sup>,  
Хищенко К.В.<sup>1,2,3,4</sup>

<sup>1</sup>МФТИ (НИУ), <sup>2</sup>ОИВТ РАН, <sup>3</sup>ФИЦ ПХФ и МХ РАН, <sup>4</sup>ЮУрГУ

30.05.2023

# Цель

- Получить уравнение состояния тантала с малым числом параметров, с достаточной точностью описывающее свойства данного металла

# Задачи

- Рассмотреть модели уравнений состояния с малым числом параметров
- Разработать алгоритм выбора параметров модели на основе экспериментальных данных
- Провести расчеты ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки, результаты расчетов сравнить с данными ударно-волновых экспериментов

# Уравнения состояния

Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса:

$$(1) \quad P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}.$$

Уравнение состояния полученное при рассмотрении модельной задачи заряженных твердых сфер [1]:

$$(2) \quad P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^{4/3}}.$$

Уравнение состояния взаимодействующих точечных центров [2]:

$$(3) \quad P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+\chi b)}.$$

Уравнение состояния с тремя параметрами:

$$(4) \quad P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^\xi}.$$

[1] Ликальтер А.А. // УФН. – 2000. – Т. 170, № 8. – С. 831–854.

[2] Петрик Г.Г., Гаджиева З.Р. // Мониторинг. Наука и технологии. 2010. Т. 1. № 2. С. 67.

# Расчет параметров уравнений состояния тантала

Параметры подбирались таким образом, чтобы отклонение от экспериментальных данных было минимальным.

$$\Delta\rho^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{i=N} \left[ \frac{\rho_{i-1}(T_i - T_{exp}) - \rho_i(T_{i-1} - T_{exp}) - \rho_{exp}(T_i - T_{i-1})}{T_i - T_{i-1}} \right]^2.$$

Также для (3) и (4) были получены уравнения связи параметров:

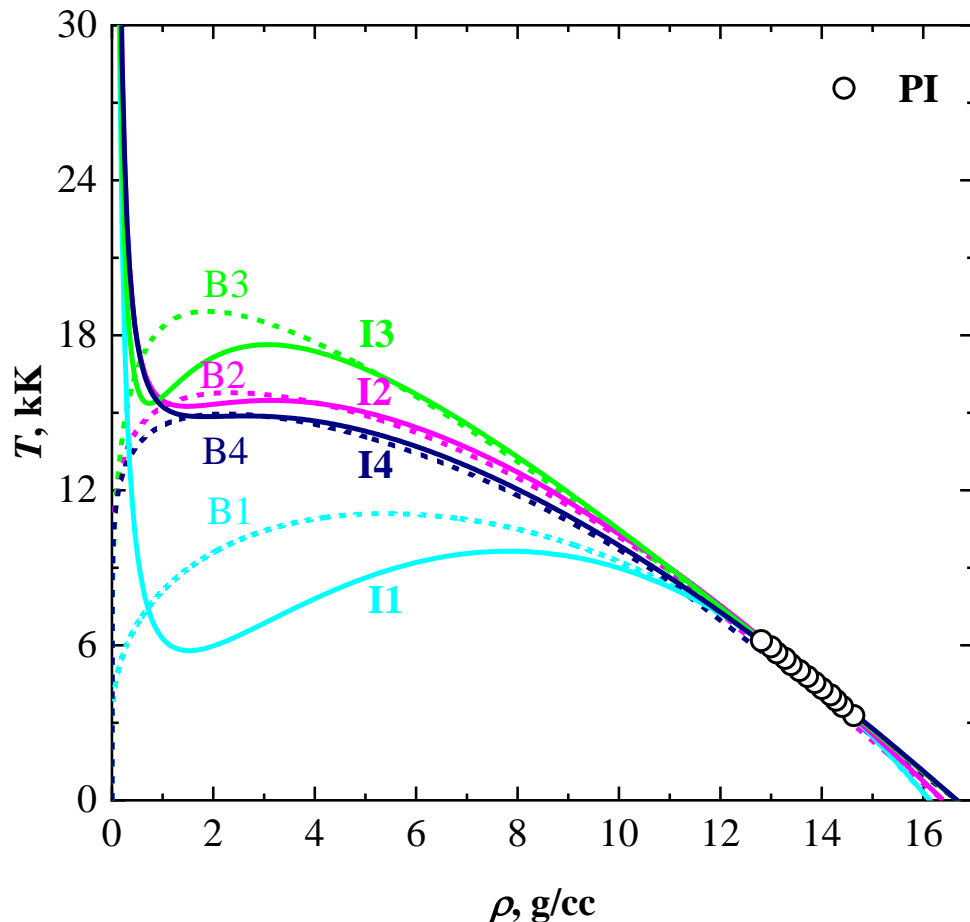
$$\frac{\chi\rho_0^2 g_1 R b}{(1 + \chi b \rho_0) \ln(1 + \chi)} - \frac{\rho_0 R T_0}{1 - b \rho_0} + \exp\left(g_0 - \frac{g_1}{T_0}\right) = 0 \quad (3sub)$$

$$a = \frac{\chi g_1 R b}{\ln(1 + \chi)}$$

$$(\xi - 1)\rho_0^\xi g_1 R b^{\xi-1} - \frac{\rho_0 R T_0}{1 - b \rho_0} + \exp\left(g_0 - \frac{g_1}{T_0}\right) = 0 \quad (4sub)$$

$$a = (\xi - 1)g_1 R b^{\xi-1}$$

# Результаты расчета параметров уравнений состояния тантала



давление на изобарах и в  
экспериментальных точках  
0.2 ГПа [3]

I1 – изобара по уравнению (1),  
I2 – изобара по уравнению (2),  
I3 – изобара по уравнению (3),  
I4 – изобара по уравнению (4).

[3] A. Berthault, L. Arles, J. Matricon // High-pressure, high-temperature thermophysical measurements on tantalum and tungsten, Intern. J. of Thermophys. 7(1), 167-179 (1986) .

# Система уравнений для расчета ударных адиабат Гюгонио

$$a) \quad E = E_0 + \frac{1}{2}(p_0 + p)(V_0 - V)$$

$$b) \quad p = p(V, T)$$

$$c) \quad E = E(V, T)$$

$$E_1 = c_v T - \frac{a}{V}$$

$$E_2 = c_v T - \frac{3a}{V^{1/3}}$$

$$E_3 = c_v T - \frac{a}{\chi b} \ln(1 + \chi b \rho)$$

$$E_4 = c_v T - \frac{a}{(\xi - 1)V^{\xi-1}}$$

*b+c) Калорические уравнения состояния:*

$$E = \frac{c_v}{R} \left( p + a\rho^\xi \right) \frac{1-b\rho}{\rho} - \frac{a}{(\xi-1)V^{\xi-1}} \quad (1'), (2'), (4')$$

$$E = \frac{c_v}{R} \left( p + \frac{a\rho^2}{1+\chi b\rho} \right) \frac{1-b\rho}{\rho} - \frac{a}{\chi b} \ln(1 + \chi b \rho) \quad (3')$$

# Теплоемкость $c_v$ для тантала

$$E_H(V) - E_0 = \int_{T_0}^{T_H} c_v dT + E_c(V) - E_{c0} = \frac{1}{2} (p_0 + p)(V_{00} - V)$$

$$1) E_c = -\frac{a}{V}$$

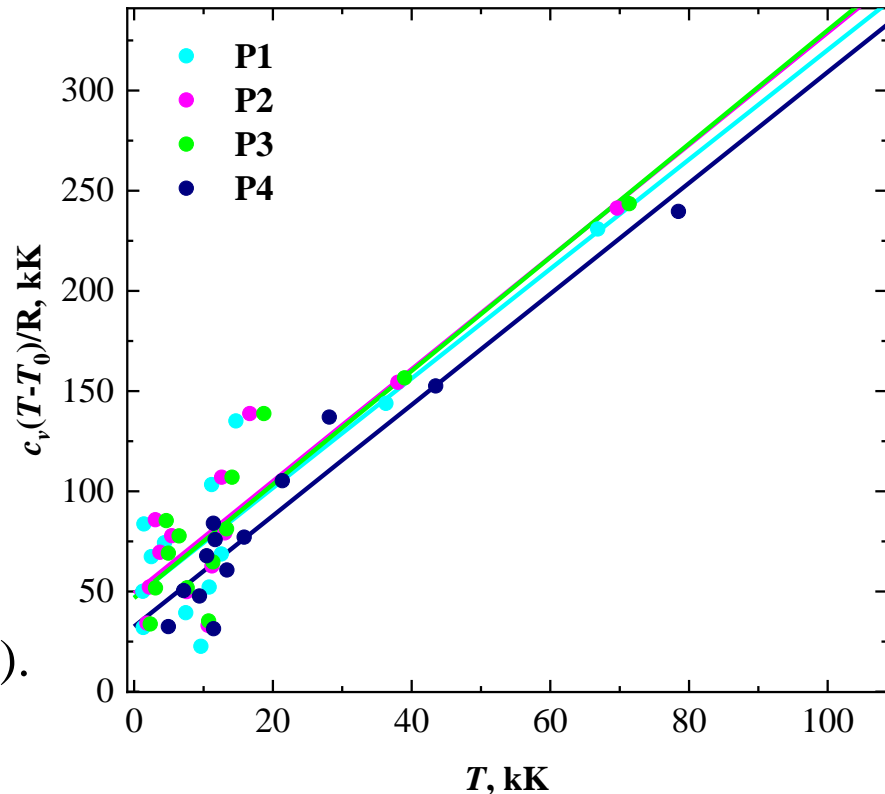
$$2) E_c = -\frac{3a}{V^{1/3}}$$

$$3) E_c = -\frac{a}{\chi b} \ln\left(\frac{V+\chi b}{V}\right)$$

$$4) E_c = -\frac{a}{(\xi-1)V^{\xi-1}}$$

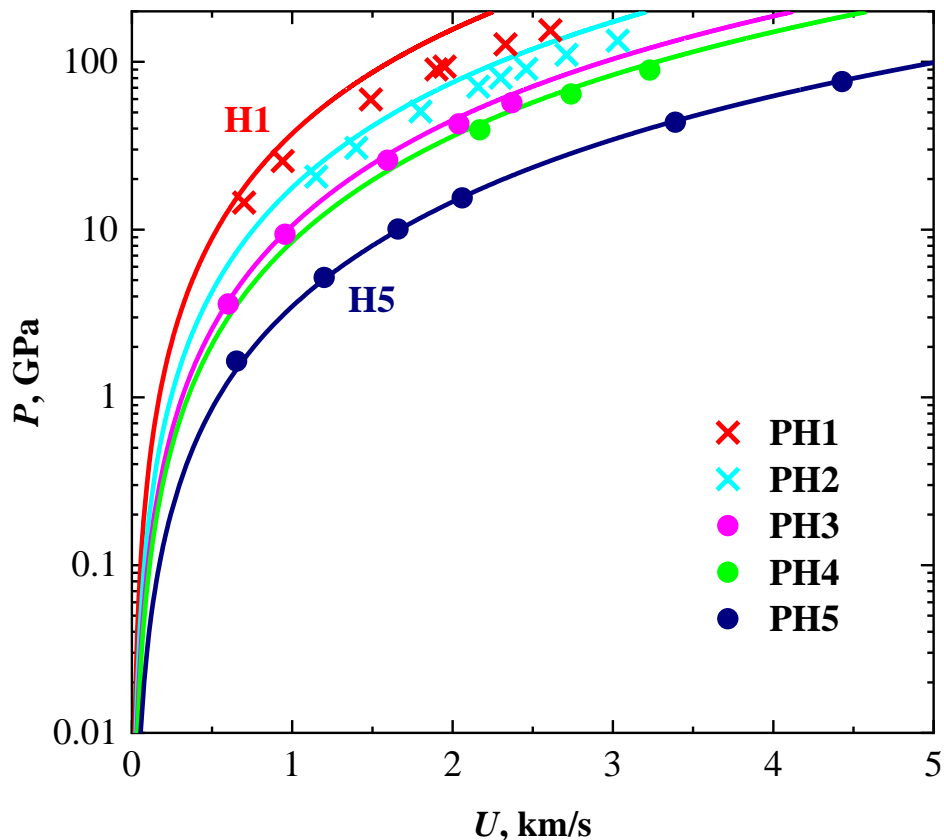
$P_i$  – расчеты по уравнению ( $i$ ).

Линии – МНК для уравнения ( $i$ ).



# Ударные адиабаты для пористых образцов тантала

Кривые соответствуют ударным адиабатам, построенным с учетом рассчитанной теплоемкости;  
PH – данные из [5]



[5] R. F. Trunin, G. V. Simakov, Yu. N. Sutulov, A. B. Medvedev, B. D. Rogozkin, Yu. E. Fedorov, Compression of porous metals in shock waves, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 96(9), 1024-1038 (1989) [in Russian] (Sov. Phys. - JETP 69(3), 580-588.



# Изоэнтропы разгрузки. Формулы расчета

$$S - S_0 = const = R \ln [T^{c_v/R}(V - b)].$$

$$\Rightarrow T^{c_v/R}(V - b) = const = T_0^{c_v/R}(V_0 - b).$$

$$\left[ \frac{p + a\rho^2}{p_0 + a\rho_0^2} \right] \left[ \frac{(1 - b\rho)\rho_0}{(1 - b\rho_0)\rho} \right]^{(c_v + R)/c_v} - 1 = 0, \quad (1'')$$

$$\left[ \frac{p + a\rho^{4/3}}{p_0 + a\rho_0^{4/3}} \right] \left[ \frac{(1 - b\rho)\rho_0}{(1 - b\rho_0)\rho} \right]^{(c_v + R)/c_v} - 1 = 0, \quad (2'')$$

$$\left[ \frac{p + a\rho^2/(1 + \chi b\rho)}{p_0 + a\rho_0^2/(1 + \chi b\rho_0)} \right] \left[ \frac{(1 - b\rho)\rho_0}{(1 - b\rho_0)\rho} \right]^{(c_v + R)/c_v} - 1 = 0. \quad (3'')$$

$$\left[ \frac{p + a\rho^\xi}{p_0 + a\rho_0^\xi} \right] \left[ \frac{(1 - b\rho)\rho_0}{(1 - b\rho_0)\rho} \right]^{(c_v + R)/c_v} - 1 = 0. \quad (4'')$$

$$u = u_0 + \int_{V(P_H)}^V \left[ - \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_s \right]^{1/2} dV.$$

# Ударные адиабаты и изоэнтропы

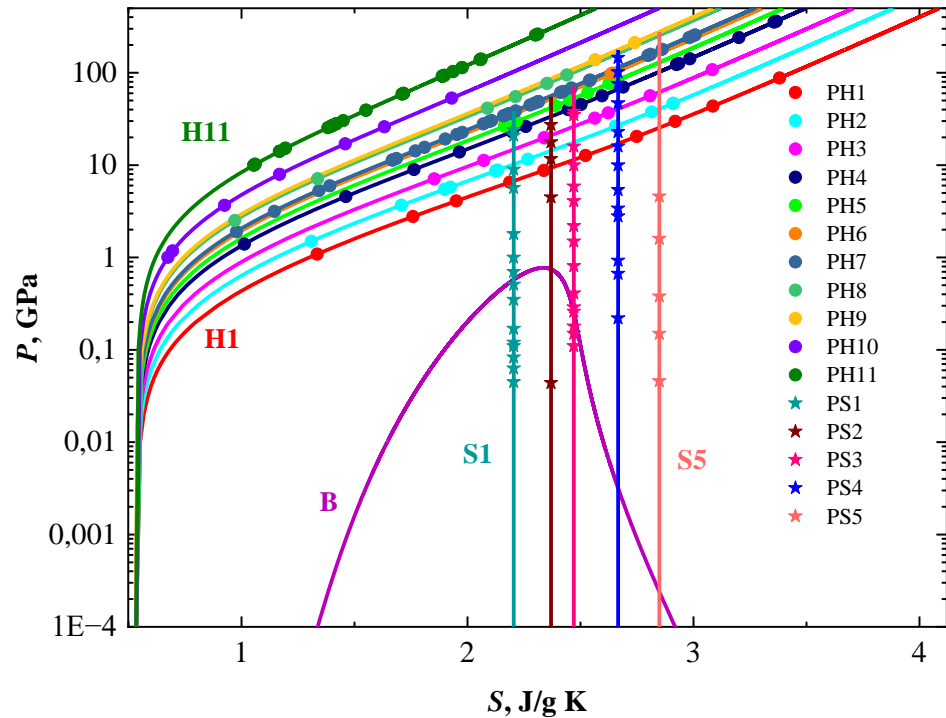
## разгрузки пористых образцов меди

Кривые соответствуют ударным адиабатам, построенным с учетом рассчитанной теплоемкости;

PH – давления из [6-15];

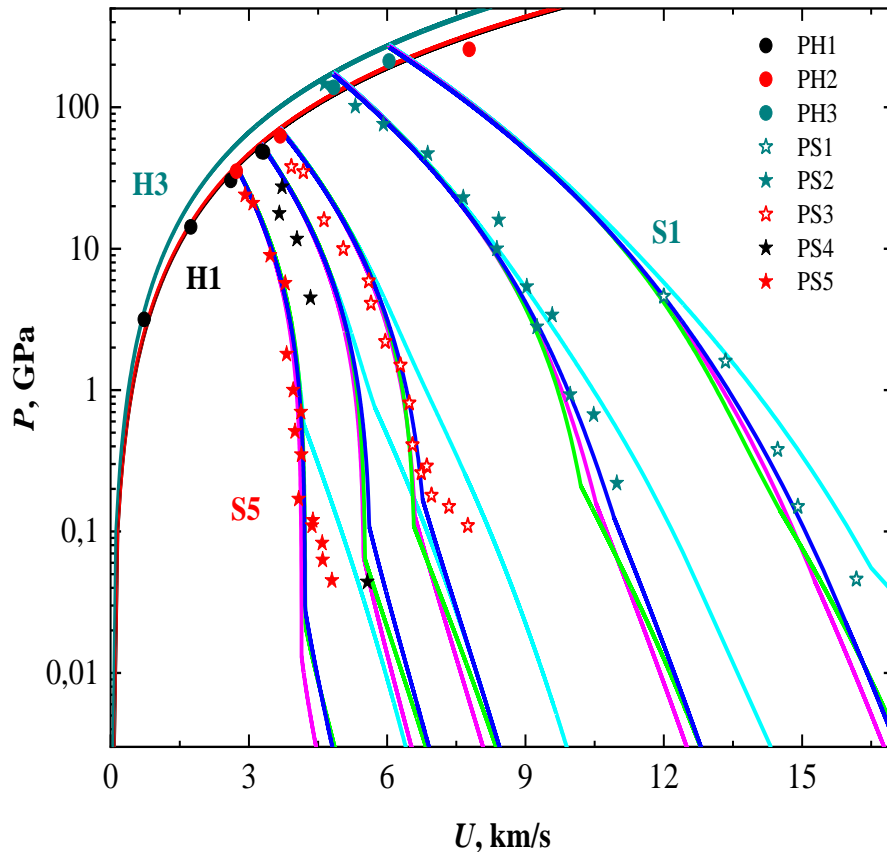
B – бинодаль по уравнению (1);

PS4 – давления из [8], PS1, PS2, PS3, PS5 – давления из [11].



[6] S. B. Kormer et al, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 42, 686-701 (1962); [7] R.R. Boade, J. Appl. Phys., 39, 5693-5702 (1968); [8] Yu. L. Alekseev et al, Zh. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz. 2, 101-106 (1971); [9] A. A. Bakanova et al, Zh. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz. 2, 117-122 (1974); [10] M. van Thiel (Ed.), Compendium of shock wave data, (Livermore: Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-50108, 1977), 142-148; [11] L. V. Al'tshuler et al, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 78, 741-760 (1980); [12] S. P. Marsh (Ed.), LASL Shock Hugoniot Data, (Univ. California Press, Berkeley, 1980); [13] R. F. Trunin et al, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 96(9), 1024-1038 (1989); [14] R. F. Trunin et al, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 95, 631-641 (1989); [15] V. K. Gryaznov et al, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 114, 1242-1265 (1998)

# Изоэнтропы разгрузки меди



H – ударные адиабата;  
S – изоэнтропы разгрузки,  
голубые линии – расчеты по (1);  
розовые линии – расчеты по (2);  
зеленые линии – расчеты по (3);  
синие линии – расчеты по (4);  
PH1 – [8], PH2 и PH3 – [11];  
PS4 – [8], PS1, PS2, PS3, PS5 – [11].

[8] Yu. L. Alekseev et al, Zh. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz. 2, 101-106 (1971).

[11] L. V. Al'tshuler et al, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 78, 741-760 (1980).

# Заключение

- По четырем простым моделям построено уравнение состояния тантала вблизи области фазового перехода жидкость-пар
- Рассчитаны ударные адиабаты металлических образцов различной исходной пористости, результаты расчетов сопоставлены с данными ударно-волновых экспериментов
- Представлен пример расчета изоэнтроп разгрузки, проведено сравнение с экспериментальными данными
- По результатам сравнения расчетов с экспериментальными данными можно указать границы применимости каждой модели

**Спасибо за внимание**