



РОСАТОМ



ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

# **Полуэмпирическое уравнение состояния твердых ( $\alpha$ , $\omega$ , $\beta$ ) фаз титана и жидкости с учетом испарения.**

В.М. Елькин, В.Н. Михайлов, Т.Ю. Михайлова

XIII ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ  
20-24 марта, 2017

## Введение

Численное моделирование поведения конструкций при воздействии на них интенсивных потоков энергии не возможно без наличия уравнений состояния, адекватно описывающих свойства материалов в широкой области температур и давлений, включающей твердое, жидкое и газообразное состояния.

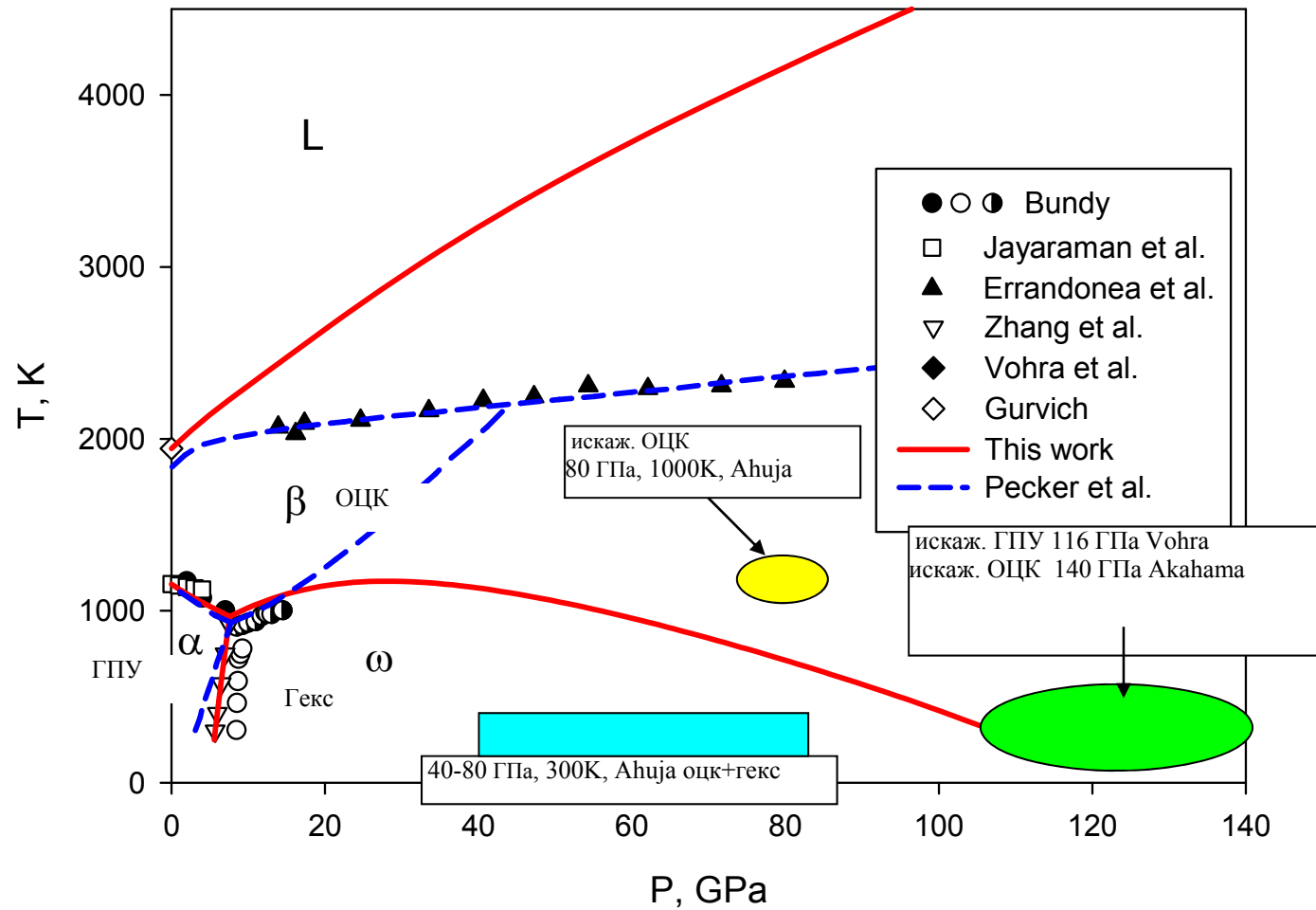
Постоянное стремление к повышению точности расчетов требует все более реалистических моделей вещества, учитывающих, в частности, возможность полиморфных превращений в твердом состоянии, сопровождающихся скачкообразным изменением плотности, сжимаемости и др. термодинамических функций вещества.

В данной работе рассматривается уравнение состояния трех твердых фаз титана, его жидкого и газообразного состояний. Поставленная задача существенно усложняется недостаточной изученностью фазовой диаграммы в области высоких давлений.

# Фазовая диаграмма

Zr, Hf: Xia, Phys.Rev.B. 1991. 44. 10374, 1990. 42 6736

TiZr: Dmitriev, Phys.Rev.B. 2006. 73. 094114



# Модель УРС



Свободная энергия Гельмгольца

$$1 \quad F(V, T) = F_C(V) + F_A(V, T) + F_E(V, T) - S_{Tr}T,$$

Холодная энергия

В области сжатия  $x < 1$ :

$$2 \quad P_C(y) = 3B_{0K} \frac{1-y}{y^5} \exp[C_0(1-y)] \left\{ 1 + C_1y(1-y) + C_2y(1-y)^2 + C_3y(1-y)^3 \right\}$$

В области растяжения  $x > 1$ :

$$3 \quad E_C(x) = V_{0K} \left[ \frac{A}{m}(x^{-m} - 1) + \frac{B}{n}(x^{-n} - 1) + \frac{C}{k}(x^{-k} - 1) \right] + E_{0K}$$
$$P_C(x) = Ax^{-(1+m)} + Bx^{-(1+n)} + Cx^{-(1+k)}$$

где  $x = V/V_{0K}$ ,  $y = x^{1/3}$ ,

# Модель УРС



Тепловая составляющая (твердые фазы):

$$4 \quad F_A(V, T) = 3RTf(\tau) - A_{Ah}RT(e^\tau - 1)^{-1}$$

$$f(\tau) = \frac{3}{8}\tau + \ln(1 - e^{-\tau}) - \frac{1}{3}D(\tau), \quad \tau = \frac{\theta(V)}{T}, \quad D(\tau) = \frac{3}{\tau^3} \int_0^\tau \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad \theta(V) - \text{Температура Дебая}$$

Функция Грюнайзена:

Л.В. Альтшулер, А.В.Бушман и др.// ЖЭТФ. 1980. 2. С.741.

$$5 \quad \Gamma(V) = \frac{2}{3} + \frac{\left(\Gamma_0 - \frac{2}{3}\right)(B^2 + D^2)}{B^2 + (D - \ln x)^2}$$

$$6 \quad \theta(V) = \theta_0 \exp \left\{ - \int_{V_{ок}}^V \frac{\Gamma(V)}{V} dV \right\} = \theta_0 x^{-\frac{2}{3}} \exp \left\{ \frac{\left(\Gamma_0 - \frac{2}{3}\right)(B^2 + D^2)}{B^2} \left[ \text{arctg} \frac{D - \ln x}{B} - \text{arctg} \frac{D}{B} \right] \right\}$$

Тепловая составляющая для жидкости:

Л.В. Альтшулер, А.В.Бушман и др.// ЖЭТФ. 1980. 2. С.741.

$$7 \quad F_A(V, T) = \frac{3RT}{2} \left[ 1 + \frac{x_a}{x + x_a} \cdot \frac{T_a}{T + T_a} \right] \ln \left[ \frac{T_{ac} (\theta(V) + Tx^{-2/3})}{T(T + T_{ac})} \right]$$

# Модель УРС



## Электронная составляющая :

Л.В. Альтшулер, А.В.Бушман и др.// ЖЭТФ. 1980. 2. С.741.

8

$$F_E(V, T) = -C_E(V, T)T \ln \left[ 1 + \frac{B_E(T)T}{2C_{Ei}} x^{\Gamma_E(V, T)} \right]$$

$$B_E(T) = \frac{2}{T^2} \int \left[ \int_0^T \beta(\tau) d\tau \right] dT, \quad C_{Ei} = \frac{3RZ}{2},$$

$$C_E(V, T) = \frac{3R}{2} \left[ Z + \frac{T_Z^2(1-Z)x}{(x+x_Z)(T^2+T_Z^2)} \right] \exp\left(-\frac{\tau_i}{T}\right),$$

$$\tau_i = T_i \exp\left(-\frac{x}{x_i}\right)$$

$$\Gamma_E(V, T) = \Gamma_{Ei} + \left( \Gamma_{E0} - \Gamma_{Ei} + \gamma_m \frac{T}{T_g} \right) \exp\left(-\frac{T}{T_g}\right)$$

$$\beta(T) = \beta_i + (\beta_0 - \beta_i) \exp\left(-\frac{T}{T_b}\right)$$

# Расчеты



Жидкость:  $C_p = 46.8$  Дж/мольК (Гурвич),  $C_p = 47.2$  Дж/мольК (NIST-JANAF),  $C_p = 47.6$  Дж/мольК (УРС)

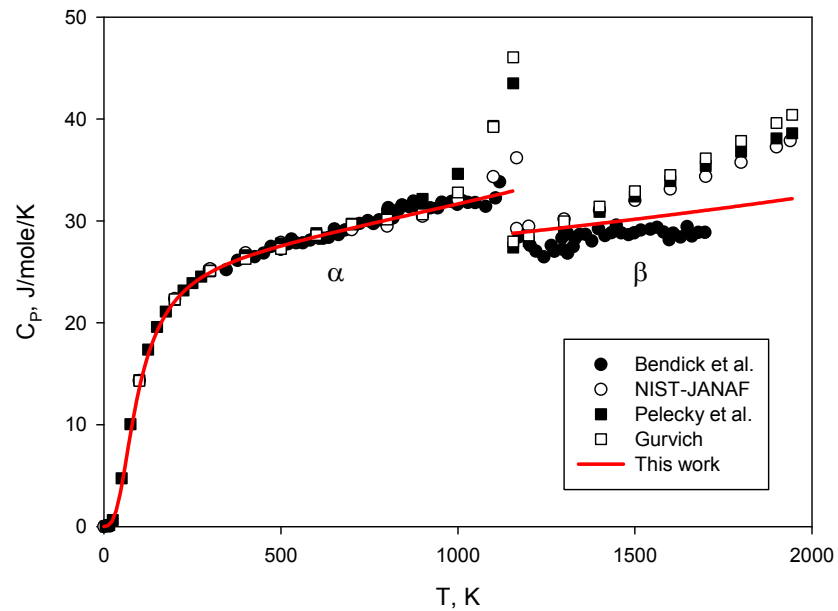


Рис.1. Теплоемкость ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) титана

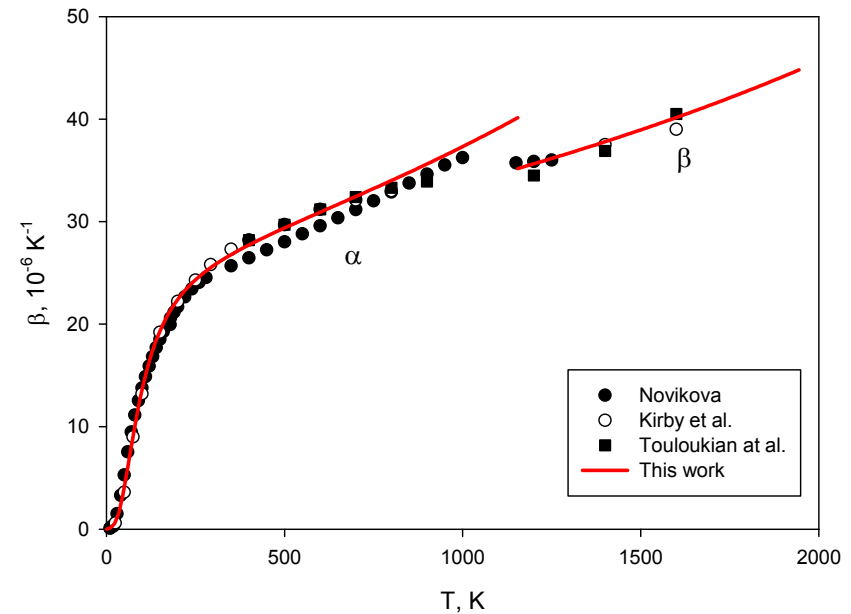


Рис. 2. Тепловое расширение ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) титана

# Расчеты

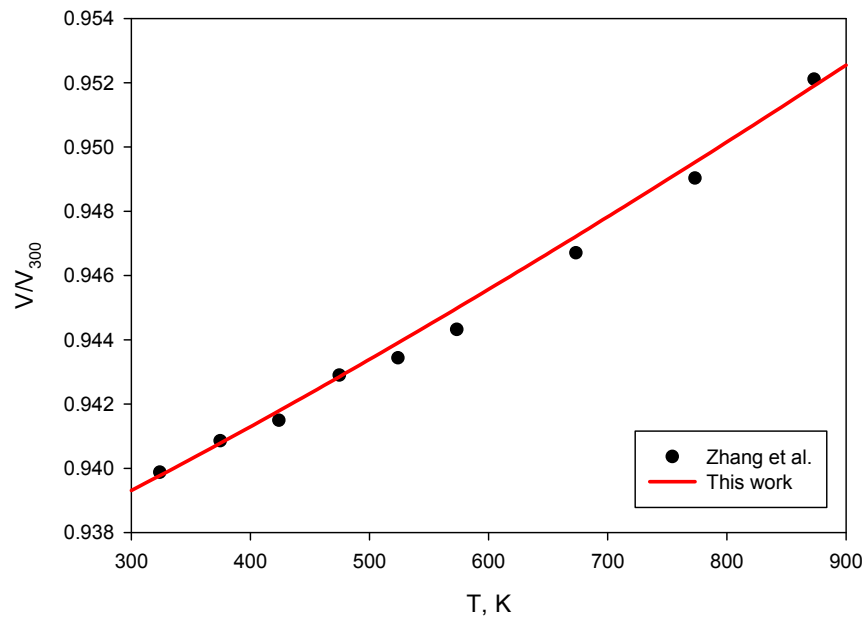


Рис.3. Тепловое расширение  $\omega$  фазы при 8.1ГПа

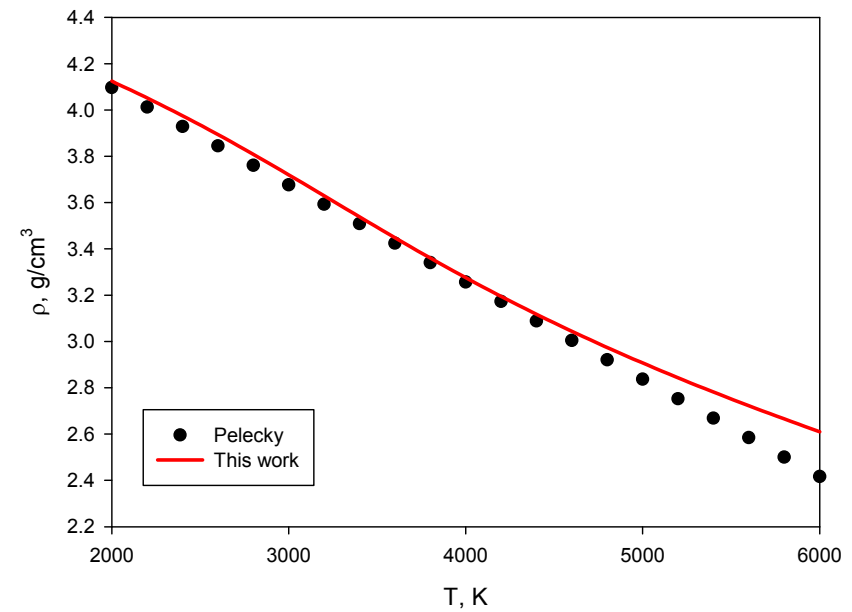


Рис. 4. Температурная зависимость плотности жидкого титана(Seydel J.Phys.F. 1979. 9.153.)



# Расчеты

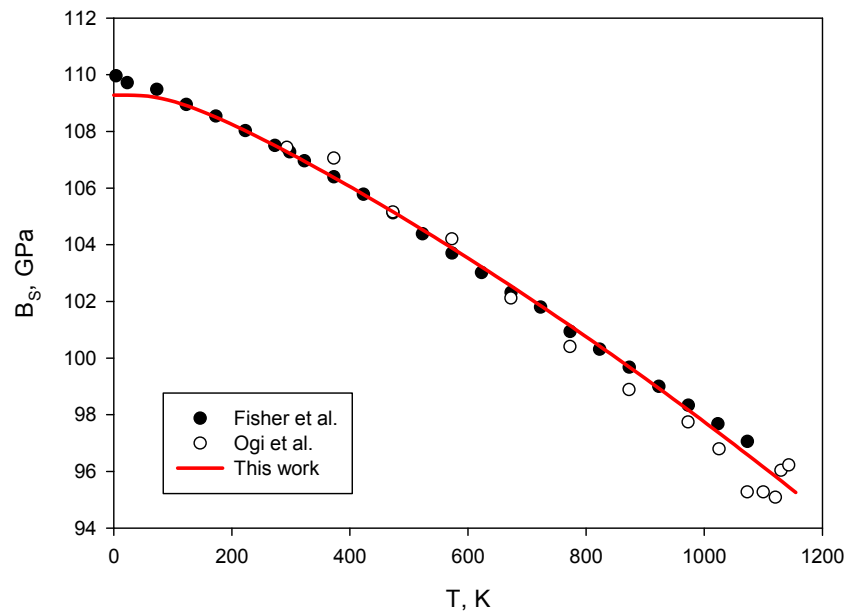


Рис. 5. Температурная зависимость объемного модуля альфа фазы

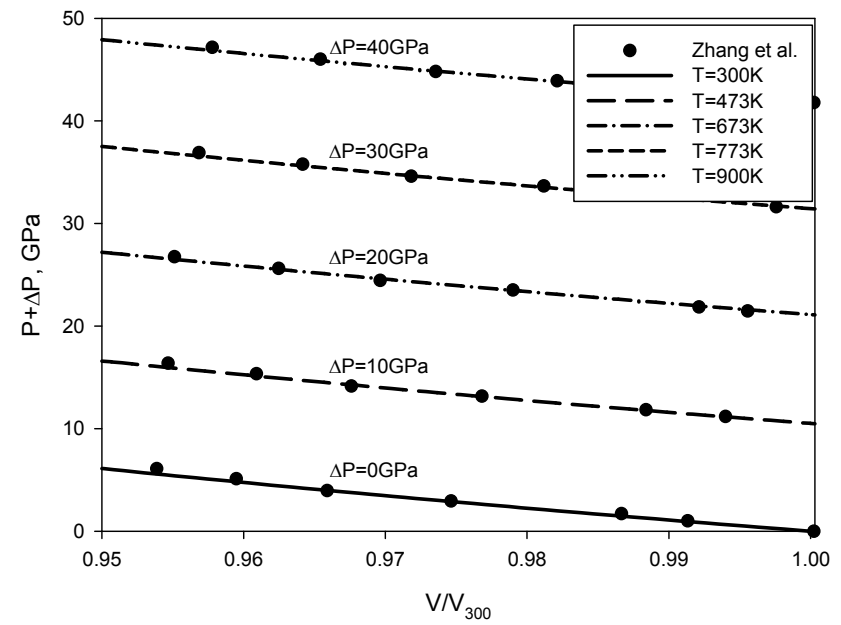


Рис. 6. Изотермическое сжатие альфа фазы

# Расчеты

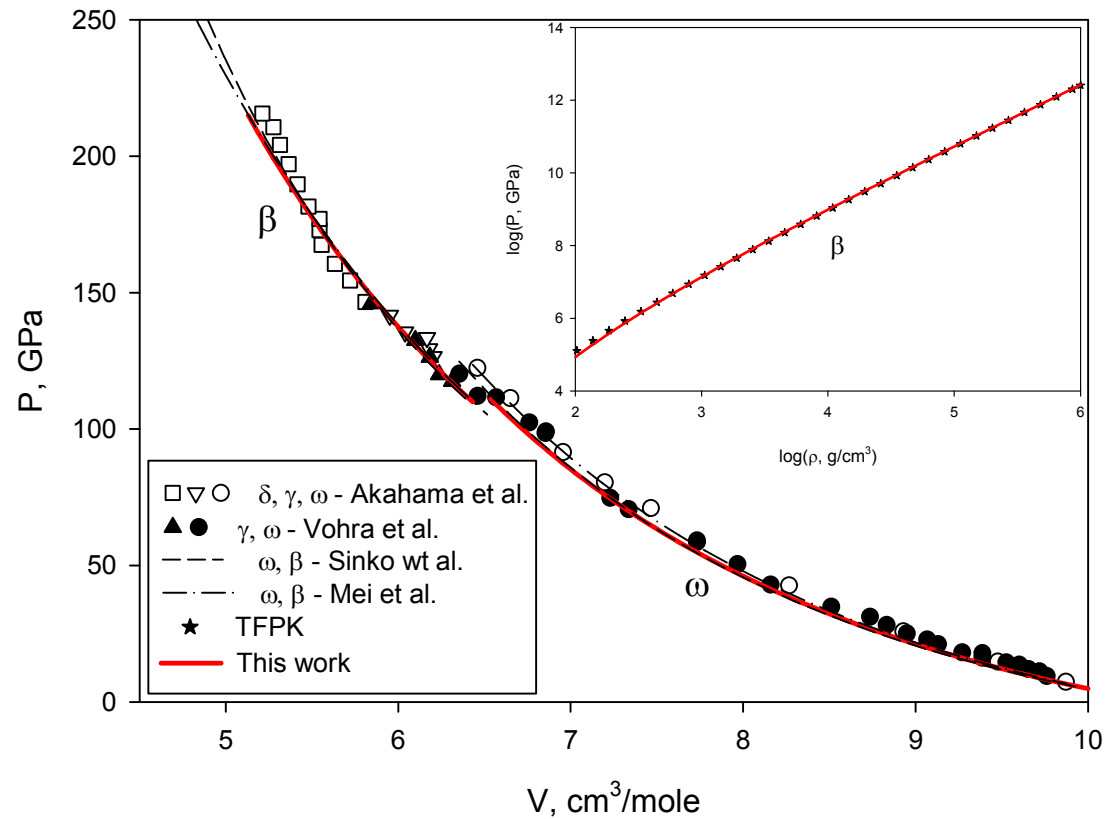


Рис. 7. Изотермическое сжатие  $\omega$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\beta$  фаз  $T=300\text{K}$ .

# Расчеты



$P_{cr} = 0.75$  ГПа,  $T_{cr} = 12075$  К - расчет

$P_{cr} = 0.76$  ГПа,  $T_{cr} = 11790$  К – Фортов ПСС

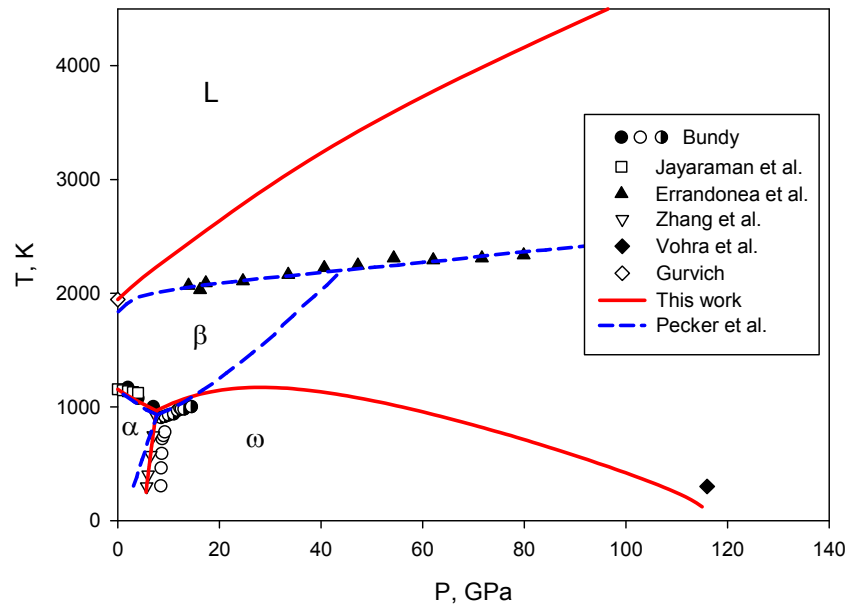


Рис 8. Фазовая диаграмма.

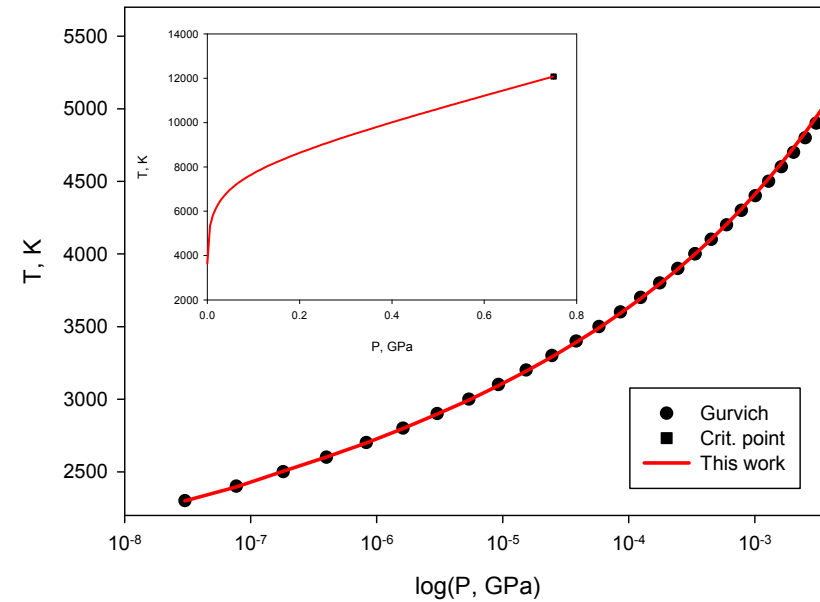


Рис. 9. Кривая равновесия жидкость-пар

# Расчеты



Модель Стейнберга

$$\mu = \mu_{300} + \mu'_P \cdot P - \mu'_T \cdot (T - 300)$$

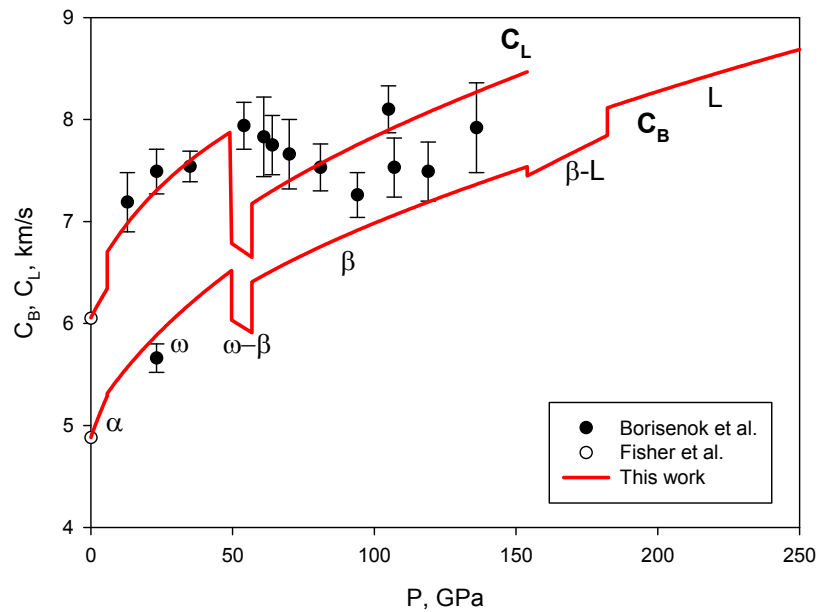


Рис. 10. Продольная  $C_L$  и объемная  $C_B$  скорости звука за фронтом УВ.

Медведев ТВТ 1999, 37, 881:  $P_{пл} = 168-183$  ГПа

	$\alpha - \omega$	$\omega - \beta$	$\beta - L$
Pressure, GPa	5.76 – 5.78	49.66 – 56.80	153.97 – 182.19
Temperature, K	319 – 326	1060 – 991	5671 – 6253

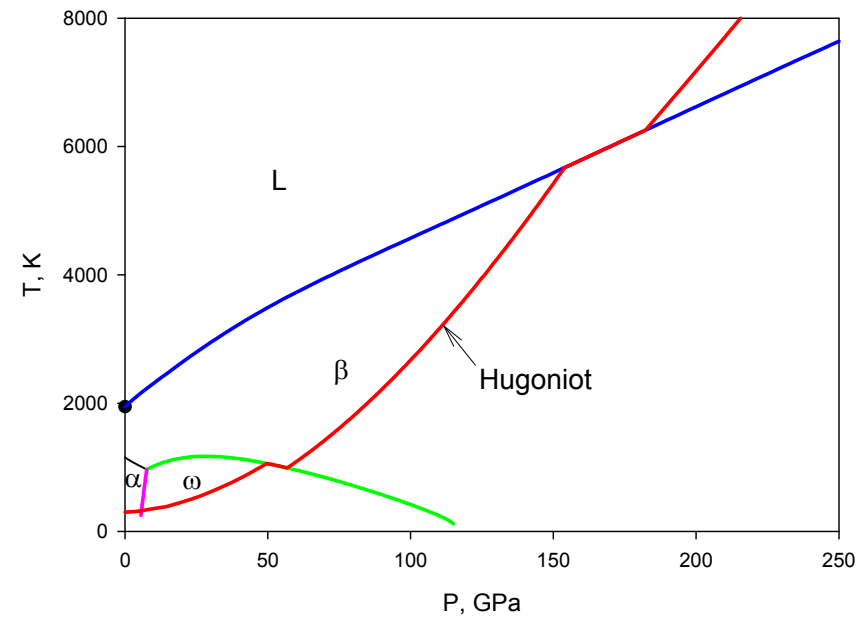


Рис. 11. Температура на ударной адиабате и фазовая диаграмма.

# Расчеты

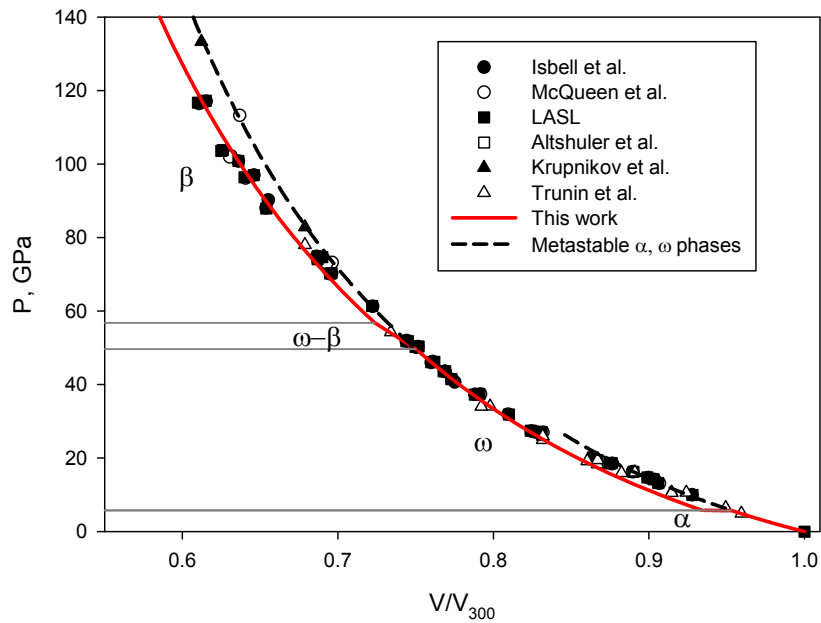


Рис. 12. Ударная адиабата титана до 140ГПа

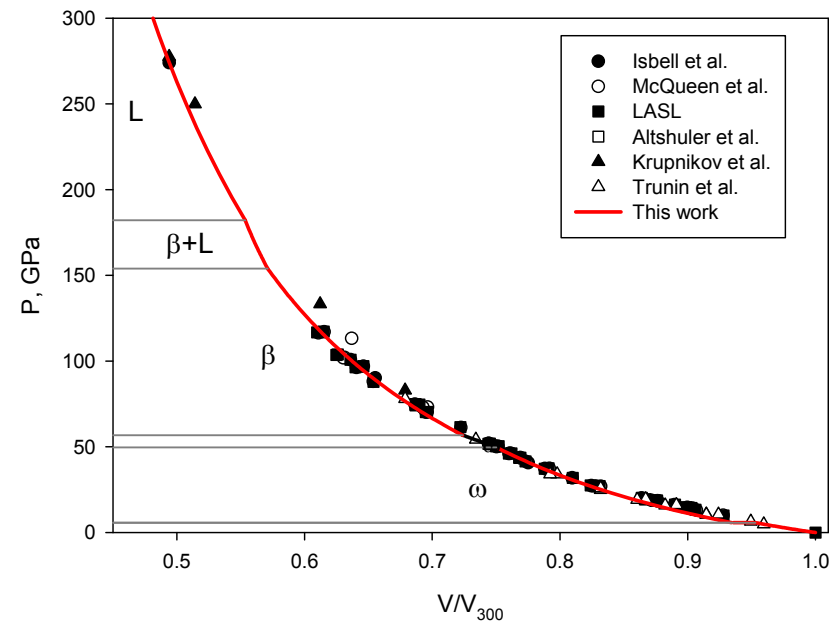


Рис. 13. Ударная адиабата в экспериментально исследованной области давлений.

# Расчеты

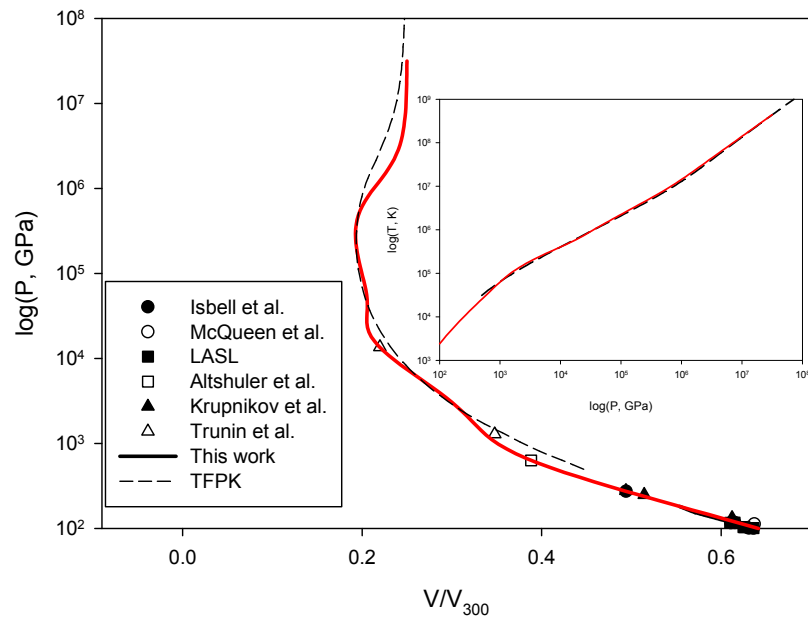


Рис. 14. Ударная адиабата в области сверхвысоких давлений.

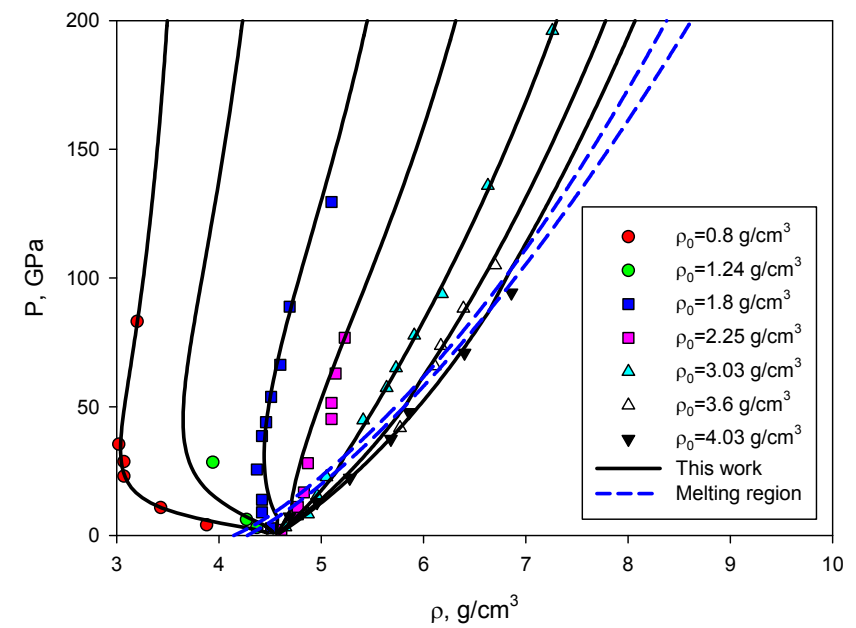


Рис. 15. Ударные адиабаты пористого титана.

# Заключение



Построено многофазное уравнение состояния титана для проведения газодинамических расчетов. Уравнение состояния содержит три твердых фазы и жидкость с учетом испарения и конденсации.