



РФЯЦ-ВНИИЭФ  
РОСАТОМ

# Многофазное полуэмпирическое широкодиапазонное уравнение состояния железа

XVII «Забабахинские научные чтения»

Свойства веществ при высокоинтенсивных процессах

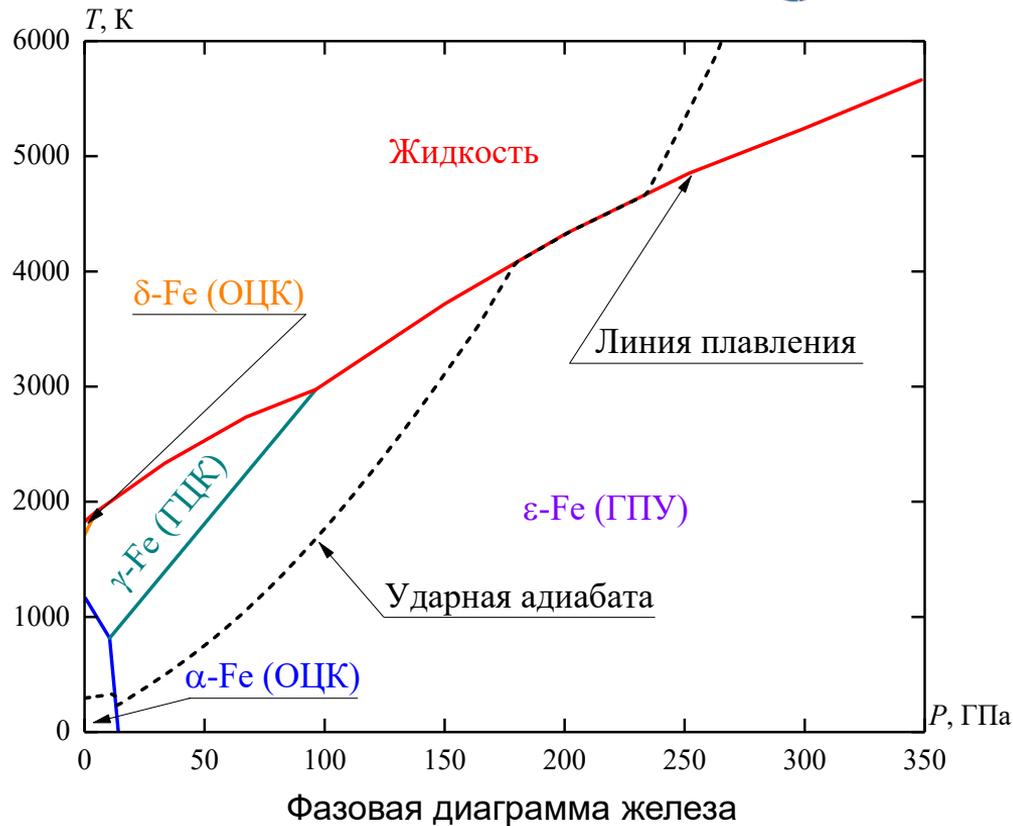
Арапов Илья Николаевич,

Каякин А.А., Данилов А.С., Гордеев Д.Г.

# Введение

**Цель:** разработать многофазное уравнение состояния железа.

**Актуальность:** необходимость увеличения точности расчетов в области фазового перехода в железе при ударно-волновом нагружении.



# Модель многофазного УРС

## Равновесное приближение

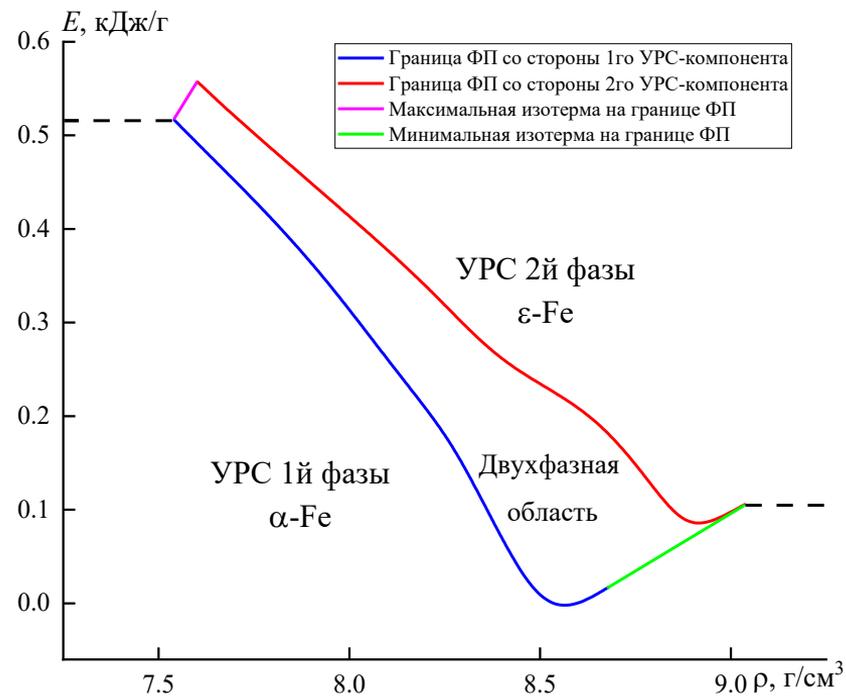
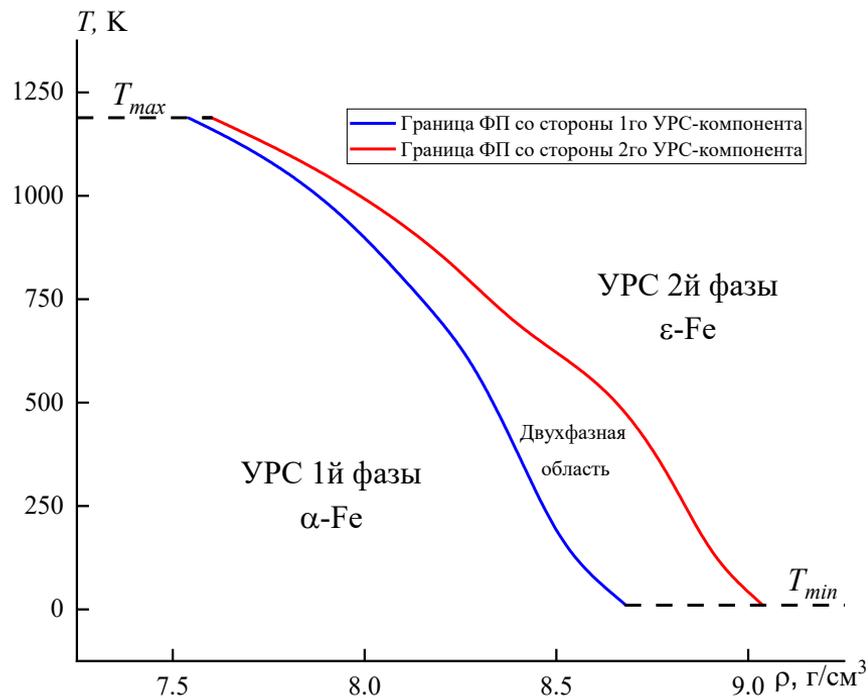
$$\left\{ \begin{array}{l} P_1(\rho_1, T) = P_2(\rho_2, T), \\ \Phi_1(\rho_1, T) = \Phi_2(\rho_2, T), \\ E = \alpha(\rho, \rho_1, \rho_2)E_2(\rho_2, T) + [1 - \alpha(\rho, \rho_1, \rho_2)]E_1(\rho_1, T); \end{array} \right. \quad \alpha(\rho, \rho_1, \rho_2) = \left( \frac{\rho_1 - \rho}{\rho_1 - \rho_2} \right) \frac{\rho_2}{\rho}$$

## Учет кинетики фазового перехода

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1(\rho_1, T) = P_2(\rho_2, T), \\ \frac{1}{\rho} = \frac{1 - \alpha^{n+1}}{\rho_1} + \frac{\alpha^{n+1}}{\rho_2}, \\ E = \alpha^{n+1}E_2(\rho_2, T) + [1 - \alpha^{n+1}]E_1(\rho_1, T); \end{array} \right. \quad \alpha^{n+1} = \alpha^n + \frac{\partial \alpha}{\partial t} \Delta t$$
$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \begin{cases} (k_{11}|\Delta\Phi|)^{k_{12}}, \Delta\Phi > 0, \\ -(k_{21}|\Delta\Phi|)^{k_{22}}, \Delta\Phi < 0; \end{cases} [1]$$
$$\Delta\Phi = \Phi_1 - \Phi_2$$

$k_{ij}$ - свободные параметры

# Модель многофазного УРС



Фазовая диаграмма железа в  $\rho$ - $T$  и  $\rho$ - $E$  координатах в области  $\alpha$ - $\epsilon$  ФП

УРС <i>твёрдого</i> тела	УРС <i>жидкости</i> (в том числе и пара)
$F_s(\delta, T) = E_{xs}(\delta) + F_{ps}(\delta, T) + F_e(\delta, T) + F_f(\delta, T);$	$F_l(\delta, T) = E_{xl}(\delta) + F_{pl}(\delta, T) + F_e(\delta, T) + F_f(\delta, T) - (\Delta S_V + \Delta S_N)T$

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

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

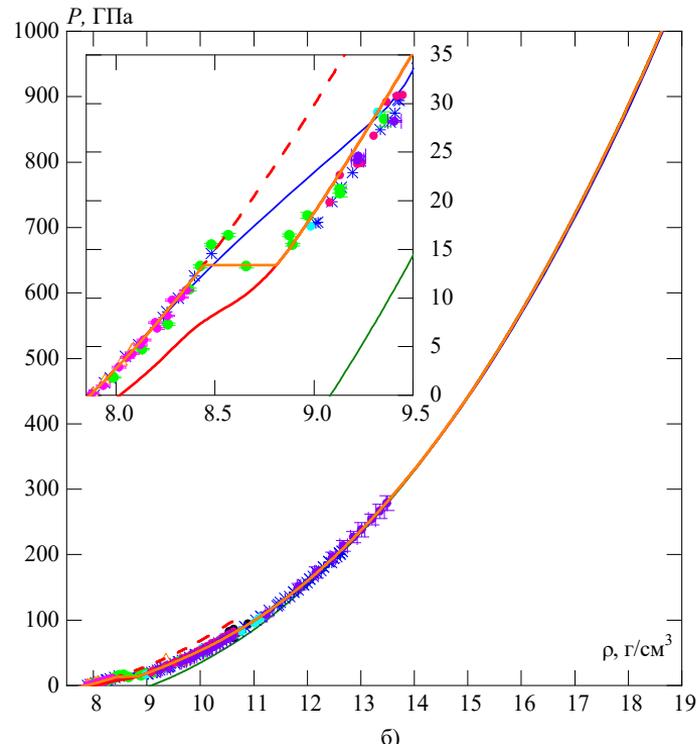
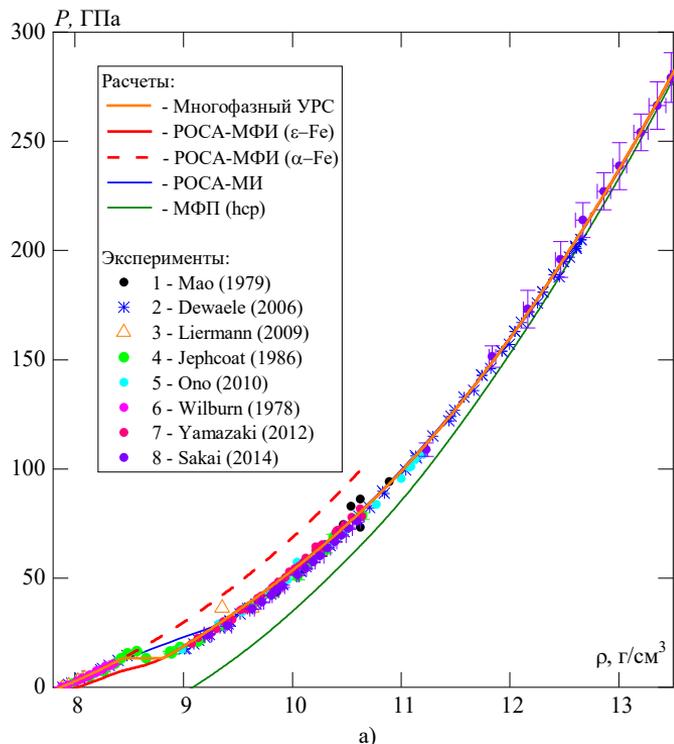
$$F_e(\delta_T, T) = -\frac{3R}{2A} \cdot T \cdot y(\delta_T, T) \cdot \ln \left[ 1 + \frac{\beta_0 AT}{3R \cdot (\delta_T \cdot y(\delta_T, T))^{\frac{2}{3}}} \right]$$

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

1. Арапов И.Н., Каякин А.А., Данилов А.С., Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф. // XVI Забабахинские чтения. – 2023.

2. Данилов А.С., Гордеев Д.Г., Шумилина О.Н., Арапов И.Н. // ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов. – 2024. – №1.

# Сравнение данных экспериментов и расчетов

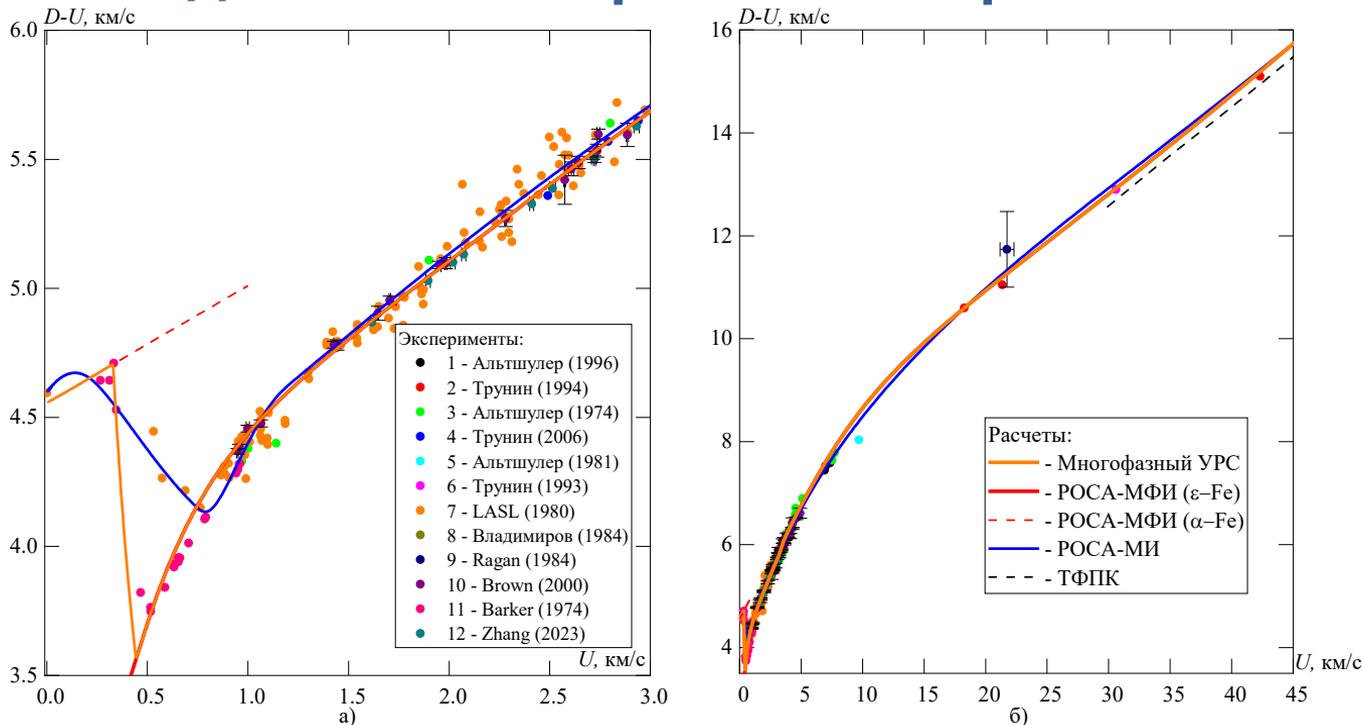


Зависимости давления от плотности на нормальной изотерме железа

1. Mao H.K., et. al. // J. Geoph. Res. – 1979. – Vol. 84.
2. Dewaele A., et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 97.
3. Lermann H.P., et. al. // Rev. Sci. Instrum. – 2009. – Vol. 80.
4. Jephcoat, et. al. // J. Geoph. Res. – 1986. – Vol. 91.

5. Ono S., et.al. // American Mineralogist. – 2010. – Vol. 95.
6. Wilburn D.R., et. al. // American Mineralogist. – 1978. – Vol. 63.
7. Yamazaki D., et. al. // Geophys. Res. Lett. – 2012. – Vol. 39.
8. Sakai T., et. al. // Phys. of Earth and Planetary Interiors. – 2014. – Vol. 228.

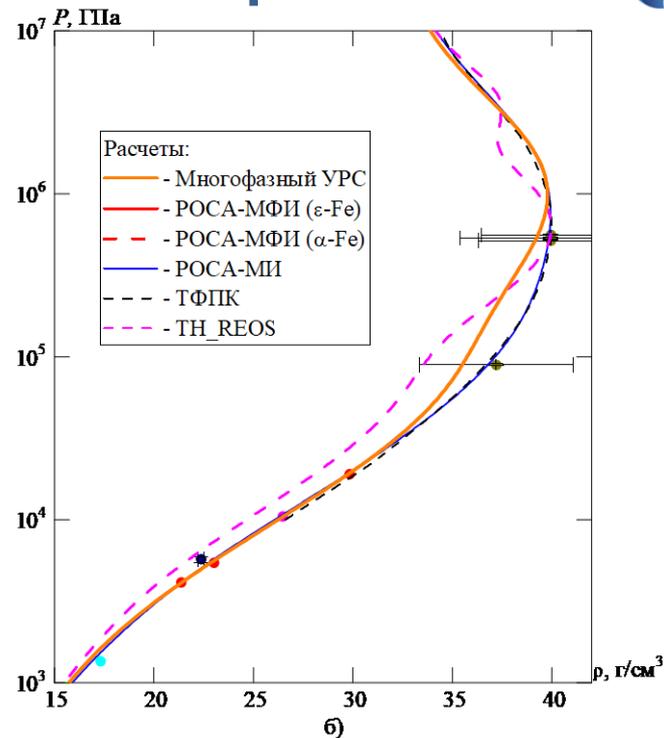
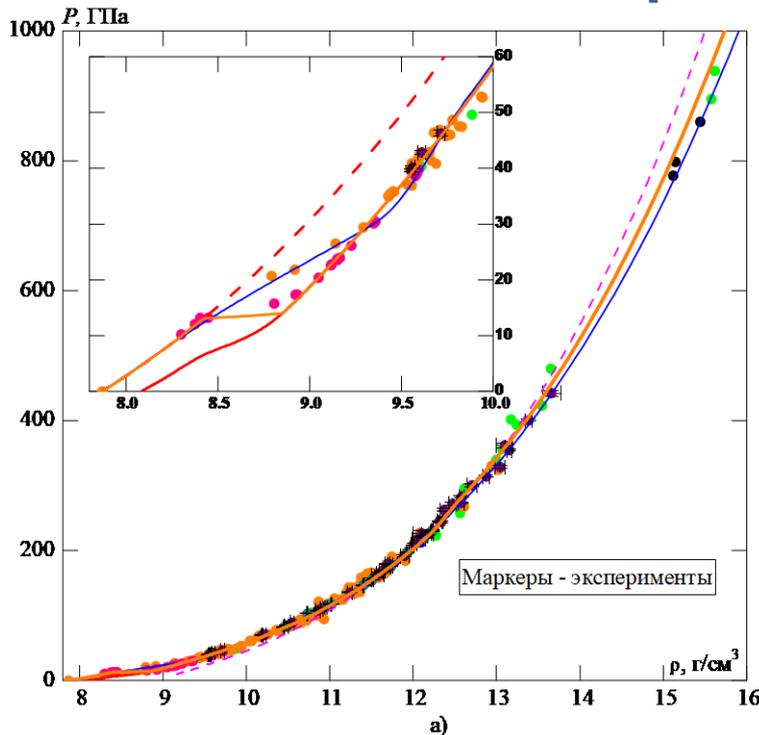
# Сравнение данных экспериментов и расчетов



## Зависимости разности волновой и массовой скоростей от массовой скорости на ударной адиабате железа

1. Альтшулер Л.В. и др. // УФН – 1996. – Т. 166, №5.
2. Трунин Р.Ф. // УФН – 1994. – Т. 164, №11.
3. Альтшулер Л.В. и др. // I Всесоюз. симп. – 1974. – Т. 1.
4. Трунин Р.Ф. и др. Эксп. данные по ударно... 2006. – 531 с.
5. Альтшулер Л.В. и др. // ПМТФ – 1981. – №2.
6. Трунин Р.Ф. и др. // ЖЭТФ – 1993. – Т. 103, №6
7. LASL Shock Hugoniot Data. Ed. Marsh S.P. 1980. – 658 p.
8. Владимиров А.С. и др. // Письма в ЖЭТФ. – 1984. – Т. 24.
9. Ragan III C.E. // Phys. Rev. A. – 1984. – Vol. 29, №3.
10. Brown J.M., et. al. // J. Appl. Phys. – 2000. – Vol. 88, №9.
11. Barker L.M., et. al. // J. Appl. Phys. – 1974. – Vol. 45.
12. Zhang Y., et. al. // PNAS. – 2023. – Vol. 120, № 41.

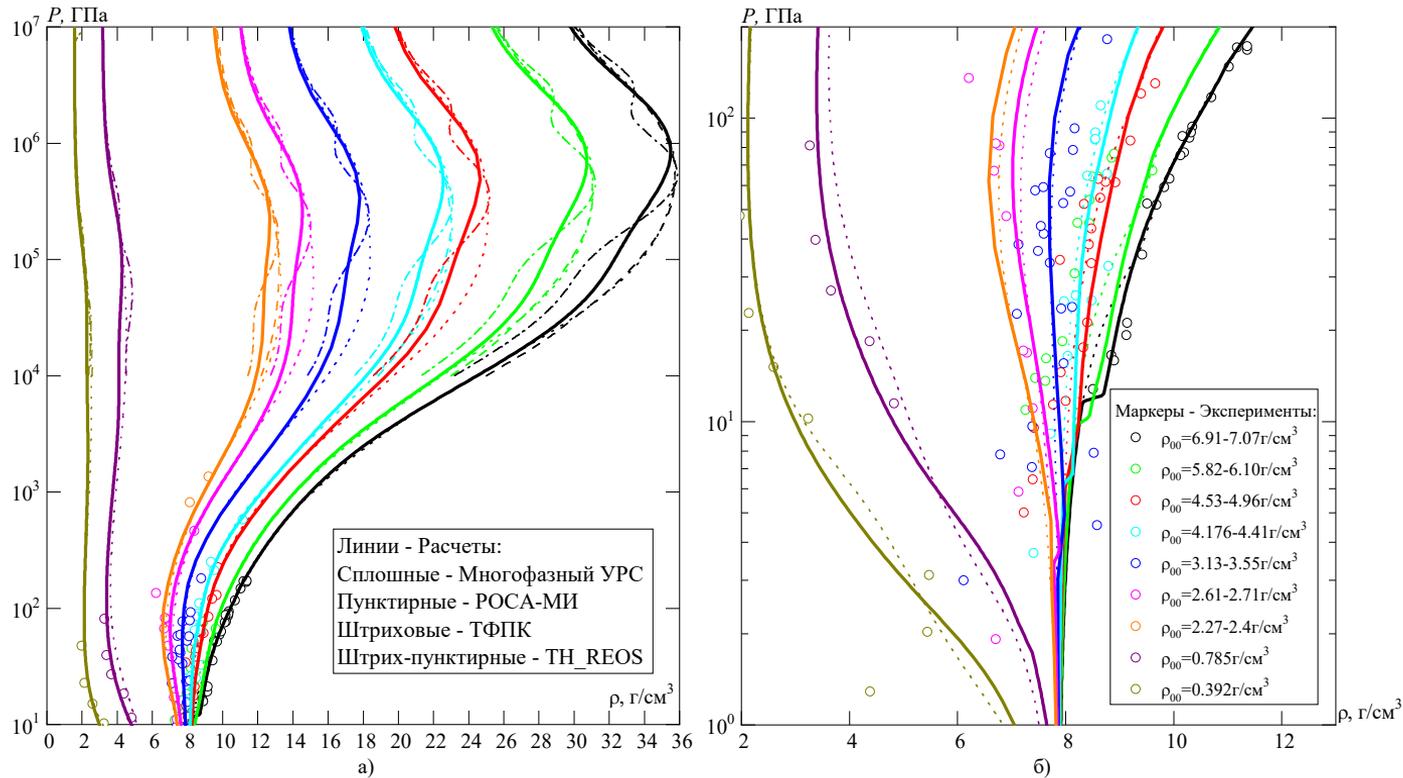
# Сравнение данных экспериментов и расчетов



Зависимости давления от плотности на ударной адиабате сплошного железа

1. Альтшулер Л.В. и др. // УФН – 1996. – Т. 166, №5.
2. Трунин Р.Ф. // УФН – 1994. – Т. 164, №11.
3. Альтшулер Л.В. и др. // I Всесоюз. симп. – 1974. – Т. 1.
4. Трунин Р.Ф. и др. Эксп. данные по ударно... 2006. – 531 с.
5. Альтшулер Л.В. и др. // ПМТФ – 1981. – №2.
6. Трунин Р.Ф. и др. // ЖЭТФ – 1993. – Т. 103, №6
7. LASL Shock Hugoniot Data. Ed. Marsh S.P. 1980. – 658 p.
8. Владимиров А.С. и др. // Письма в ЖЭТФ. – 1984. – Т. 24.
9. Ragan III C.E. // Phys. Rev. A. – 1984. – Vol. 29, №3.
10. Brown J.M., et. al. // J. Appl. Phys. – 2000. – Vol. 88, №9.
11. Barker L.M., et. al. // J. Appl. Phys. – 1974. – Vol. 45.
12. Zhang Y., et. al. // PNAS. – 2023. – Vol. 120, № 41.

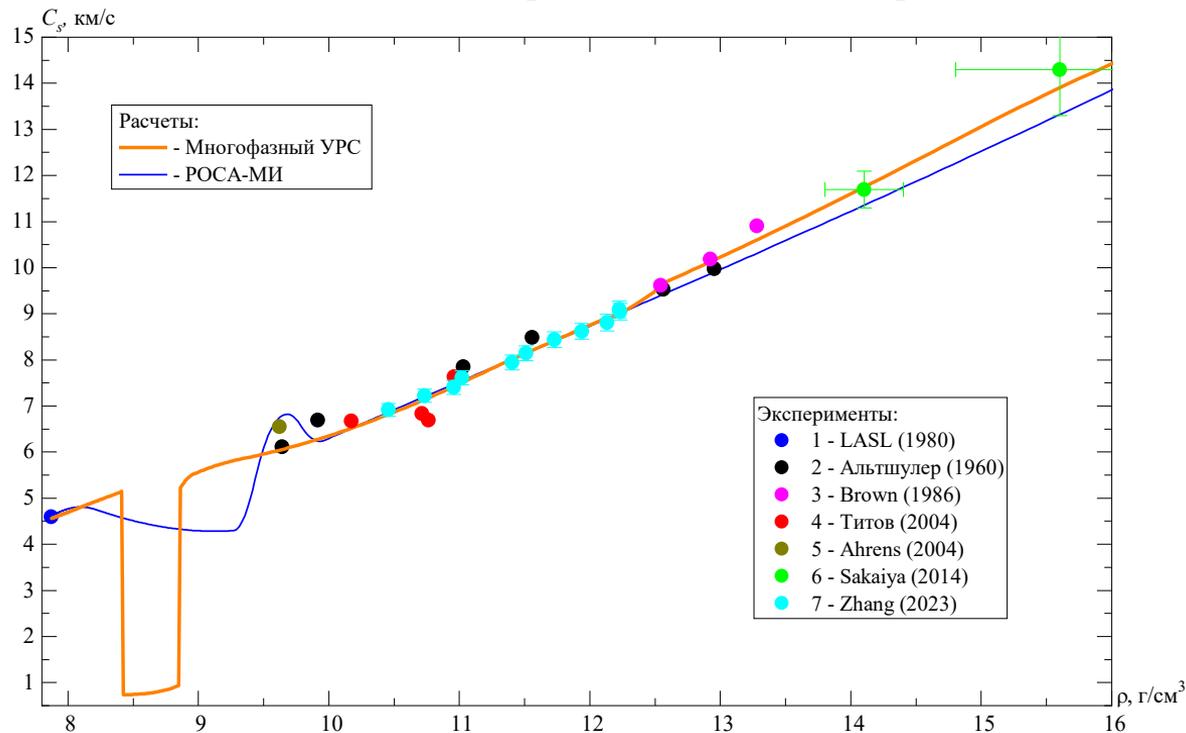
# Сравнение данных экспериментов и расчетов



Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах пористого железа

1. Трунин Р.Ф. и др. Эксп. данные по ударно... 2006. 531 с.
2. LASL Shock Hugoniot Data. Ed. Marsh S.P. 1980. – 658 p.

# Сравнение данных экспериментов и расчетов



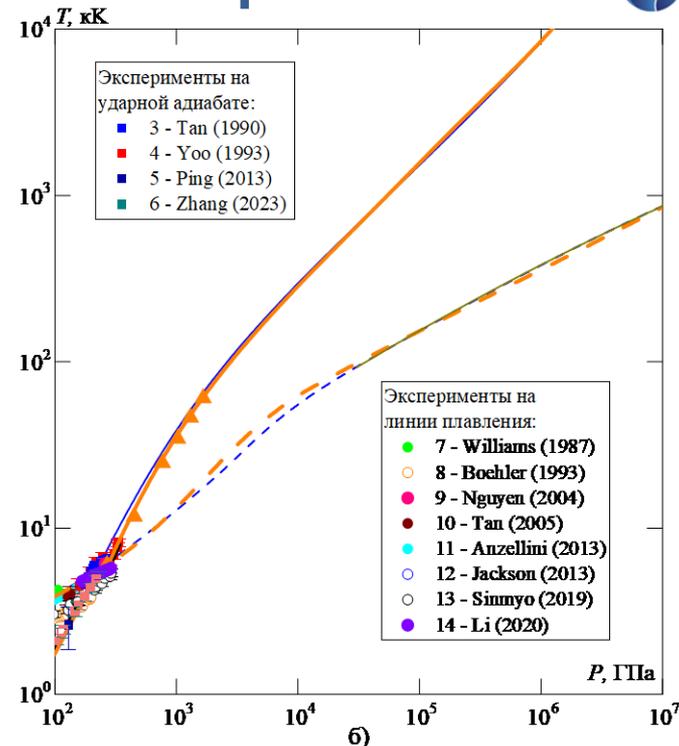
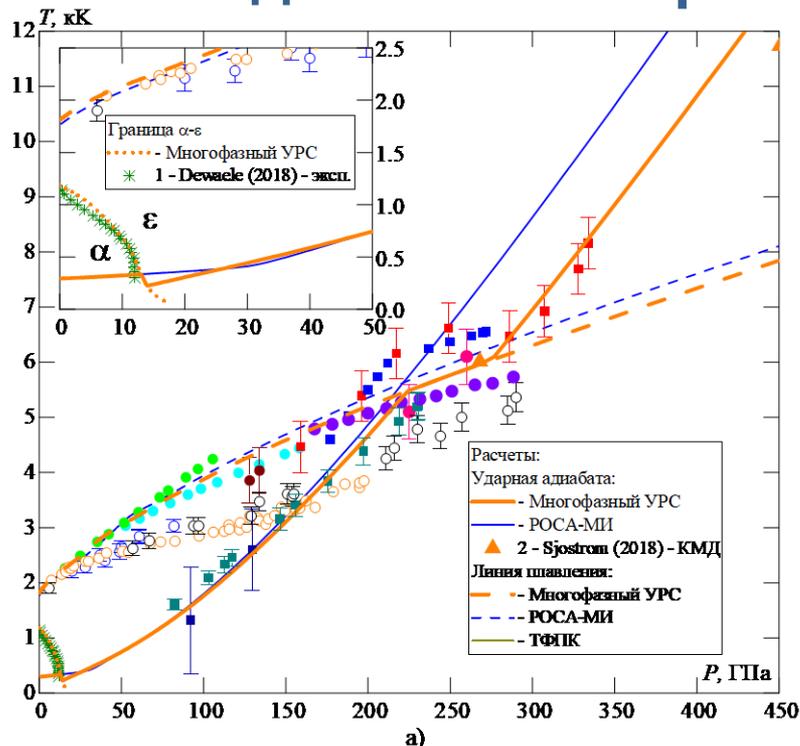
Зависимости объемной скорости звука в железе от плотности за фронтом ударной волны

1. LASL Shock Hugoniot Data. Ed. Marsh S.P. 1980. – 658 p.
2. Альтшулер Л.В. и др. // ЖЭТФ. – 1960. – Т. 38. Вып. 4.
3. Brown J.M., et. al. // J. Geoph. Res. – 1986. – Vol. 91.

4. Титов В.М. и др. // ФГВ. – 2004. – Т. 40, №4.
5. Ahrens T.J., et. al. // Geophys. Res. Lett. – 2002. – Vol. 29, №7.
6. Sakaiya T., et. al. // Earth and Planetary Sci. Lett. – 2014. – Vol. 392.

7. Zhang Y., et. al. // PNAS. – 2023. – Vol. 120, №41.

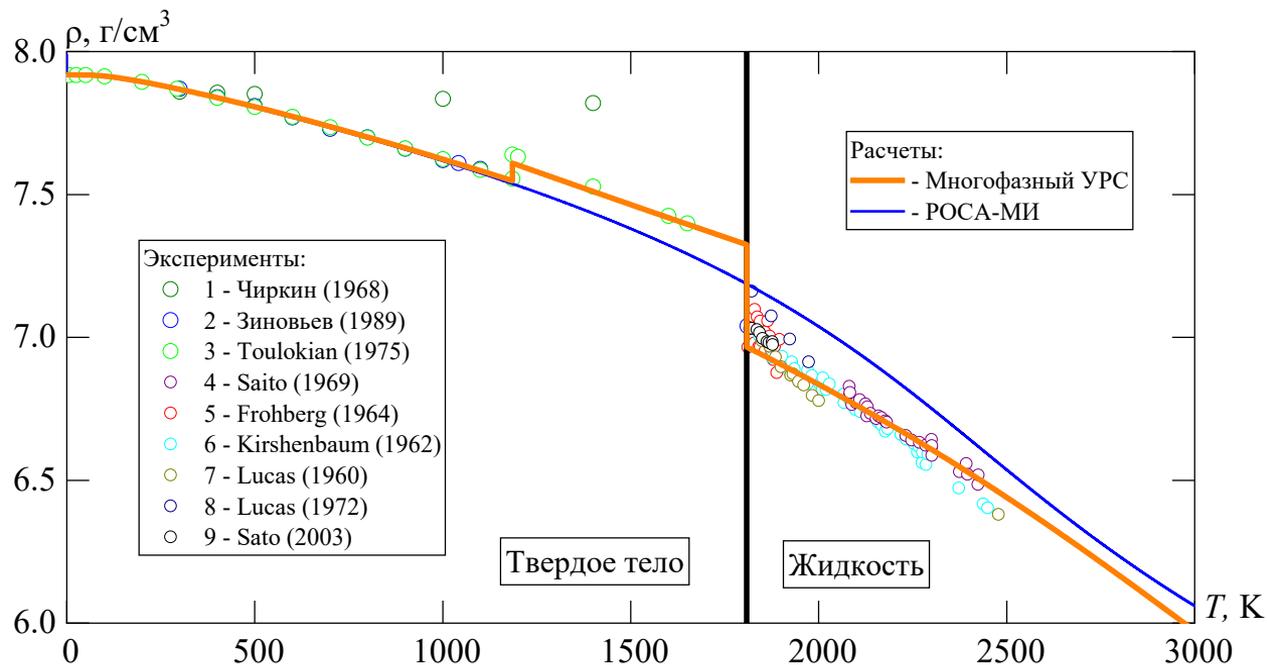
# Сравнение данных экспериментов и расчетов



Зависимости температуры от давления на ударной адиабате и линии плавления железа

- |  |   |   |
|--|---|---|
| 1. Dewaele A., et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2018. – Vol. 112.  | 6. Zhang Y., et. al. // PNAS. – 2023. – Vol. 120, №41.      | 11. Anzellini S., et. al. // Science. – 2013. – Vol. 340.                       |
| 2. Sjoström T., et. al. // Phys. Rev. E. – 2018. – Vol. 97.      | 7. Williams Q., et. al. // Science. – 1987. – Vol. 236.     | 12. Jackson J.M., et. al. // Earth and Planetary Sci. Lett. – 2013. – Vol. 362. |
| 3. Tan H., et. al. // High Pres. Res. – 1990. – Vol. 2.          | 8. Boehler R., et. al. // Nature. – 1993. – Vol. 363.       | 13. Sinmyo R., et. al. // Earth and Planetary Sci. Lett. – 2019. – Vol. 510.    |
| 4. Yoo C.S., et. al. // Phys. Rev. Lett. – 1993. – Vol. 70, №25. | 9. Nguyen J., et. al. // Nature. – 2004. – Vol. 427.        | 14. Li Z, et. al. // Earth and Planetary Sci. Lett. – 2020. – Vol. 547.         |
| 5. Ping Y., et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2013. – Vol. 111.      | 10. Tan H., et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 87. |   |

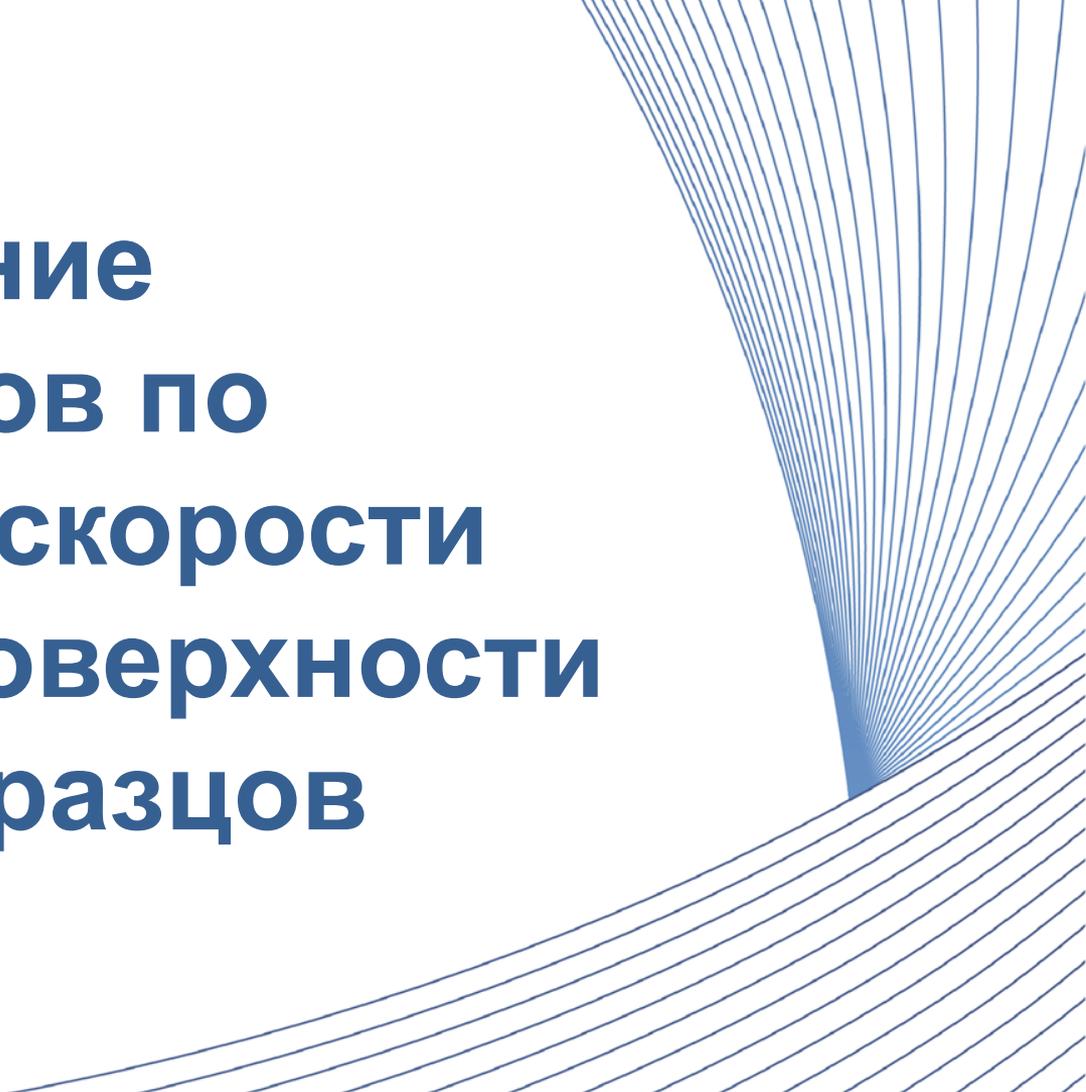
# Сравнение данных экспериментов и расчетов



Зависимости плотности железа от температуры на нормальной изобаре  $P=10^{-4}$  ГПа

1. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. 1968. – 484 с.
2. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов... 1989. – 384 с.
3. Touloukian Y.S. et al. Thermophysical properties of matter. Vol 12. 1975. – 1445 p.
4. Saito T., et. al. // Transaction ISIJ. – 1969. – Vol. 9.
5. Frohberg M.G., et. al. // Arch. Eisenhuttenw. – 1964. – Vol. 35.
6. Kirshenbaum A.D., et. al. // Trans. Metal. Soc. AIME. – 1962. – Vol. 224.
7. Lucas L.D. // Compt. Rend. – 1960. – Vol. 250.
8. Lucas L.D. // Mem. Sci. Rev. Met. – 1972. – Vol. 69.
9. Из Assael M.J., et. al. // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 2006. – Vol. 35, №1.

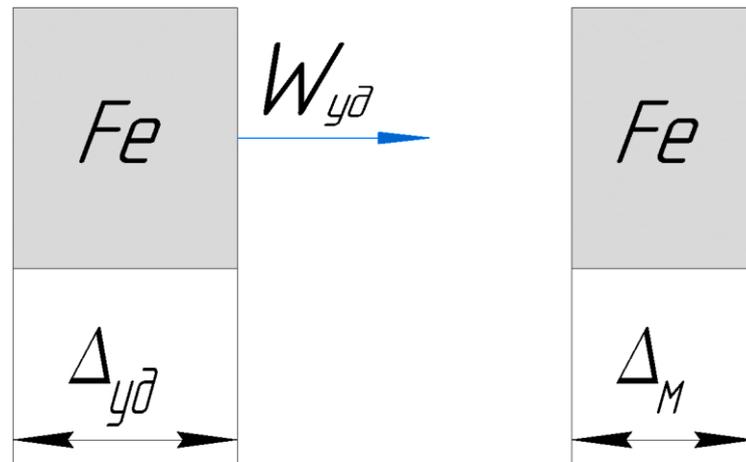
# **Моделирование экспериментов по регистрации скорости свободной поверхности железных образцов**



# Постановка расчетов

Данные постановок [1]

№	$\Delta_{уд}$ , мм	$\Delta_M$ , мм	$W_{уд}$ , км/с	$\sigma_{max}$ , ГПа
1	6.335	6.375	0.6157	12.1
2	6.33	6.317	0.9916	17.3
3	6.35	6.312	1.15	20.4
4	6.337	6.37	1.567	30.4



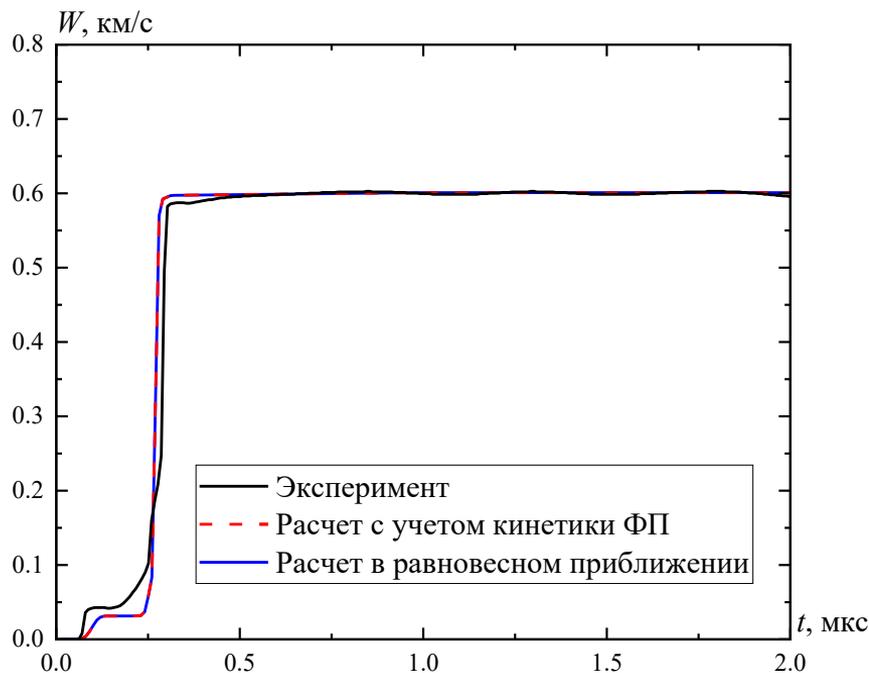
Расчетная схема задачи

Прочностные свойства описывались моделью [2]:

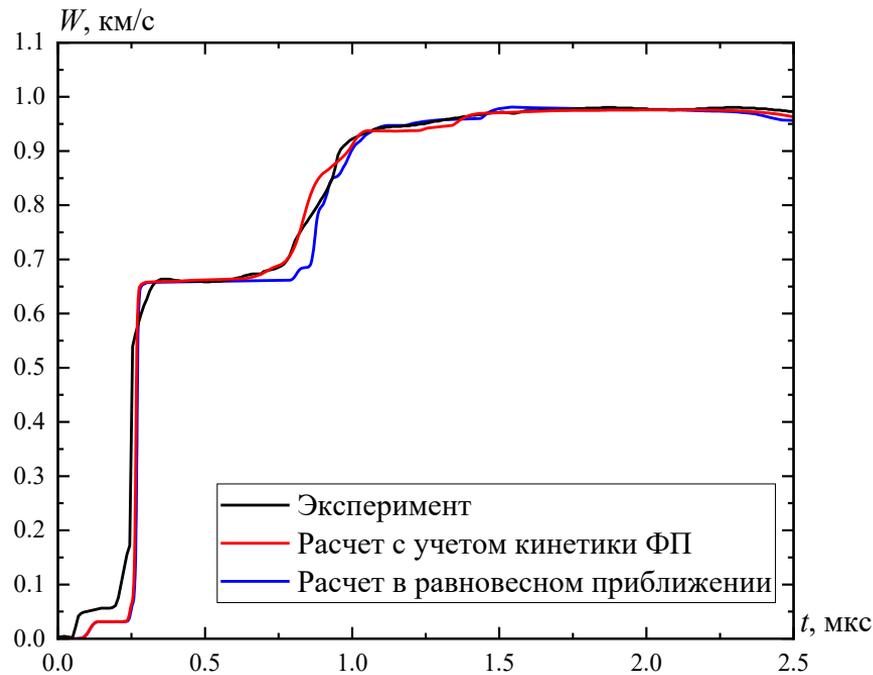
$$Y_D = Y_0 \left[ 1 + a_1 \left( 1 - \bar{T}^{a_3} \right) \left( 1 - \exp(-a_2 \varepsilon_i^p) \right) \right] [1 + a_4 P] \left[ 1 - a_5 \bar{T}^{a_6} \right]$$

1. Barker L.M., et, al. // J. Appl. Phys. – 1974. – Vol. 45.
2. Глушак Б.Л. Начала физики взрыва. – 2011. – 308 с.

# Сравнение профилей скорости

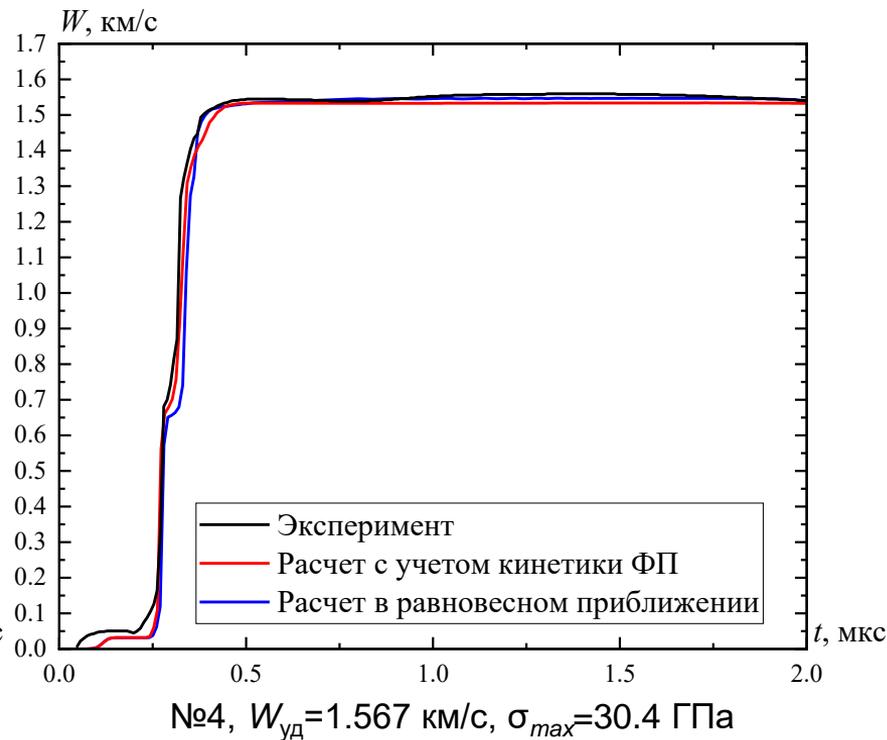
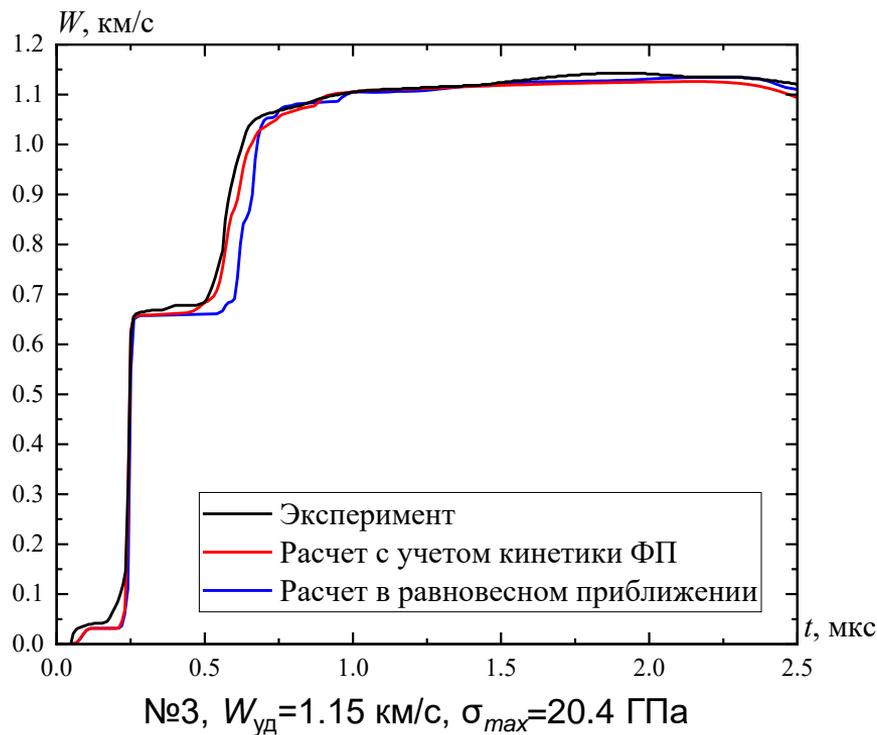


№1,  $W_{уд} = 0.6157$  км/с,  $\sigma_{max} = 12.1$  ГПа



№2,  $W_{уд} = 0.9916$  км/с,  $\sigma_{max} = 17.3$  ГПа

# Сравнение профилей скорости



# Заключение

Описана модель, позволяющая создавать многофазные уравнения состояния различных материалов путем «сшивки» отдельных (локальных) уравнений состояния его полиморфных фаз. Вычисления в двухфазной области могут проводиться как в равновесном приближении, так и с учетом межфазной кинетики при переходе от одной фазы твердого тела к другой.

В результате разработки УРС железа проведена апробация модели многофазного уравнения состояния. Для описания сшиваемых фаз, использовалась модель РОСА-МФИ. В работе представлено сравнение данных экспериментов и расчетов по теоретическим моделям с расчетами по разработанному УРС.



РФЯЦ-ВНИИЭФ  
РОСАТОМ

# Спасибо за внимание!

XVII «Забабахинские научные чтения»

Свойства веществ при высокоинтенсивных процессах

Арапов Илья Николаевич,

Каякин А.А., Данилов А.С., Гордеев Д.Г.