XVII Международная конференция «ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ» 19 - 23 мая 2025, Снежинск, Россия

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЖИДКОГО И ГАЗООБРАЗНОГО ЖЕЛЕЗА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

<u>Боярских К.А.</u>, Хищенко К.В.

ОИВТ РАН 19.05.2025

Цель

Получить уравнение состояния жидкой и паровой фаз железа на основе простых моделей

Задачи

- Рассмотреть простые термодинамические модели, позволяющие описать металлы в жидком и газообразном агрегатных состояниях
- ▶ Получить уравнение состояния жидкой фазы железа
- ▶ Получить уравнение состояния жидкого и газообразного железа
- Провести расчеты термодинамических характеристик в области фазового перехода жидкость-пар, сравнить модельные зависимости с экспериментальными данными
- Получить модельные зависимости для описания свойств железа в высокоинтенсивных процессах, сравнить результаты расчетов с данными экспериментов

Модель STEOS2

Здесь и далее введены следующие обозначения: $\sigma = \frac{V_0}{V}; \ \varsigma = \frac{V_{0c}}{V}.$

$$F(V,T) = F_c(V) + F_a(V,T) + F_e(V,T)$$
(1)

$$F_{c}(V) = \frac{V_{0c}B_{0c}}{mn} \left(\frac{n\varsigma^{m} - m\varsigma^{n}}{m - n} + 1\right)$$
(2)

$$F_a(V,T) = -\frac{3}{2}RT \ln \frac{T^2}{\theta^2 + T_a \sigma^{2/3}T}$$
(3)

$$\theta(V) = \theta_0 \sigma^{2/3} \exp\left[\left(\gamma_0 - \frac{2}{3}\right) \frac{\delta_n + \ln^2 \sigma_m}{\sqrt{\delta_n}} \left(\operatorname{arctg}\left(\frac{\ln \sigma / \sigma_m}{\sqrt{\delta_n}}\right) + \operatorname{arctg}\left(\frac{\ln \sigma_m}{\sqrt{\delta_n}}\right)\right)\right] (4)$$

$$F_e(V,T) = -\frac{1}{2}\beta_{e0}\sigma^{-\gamma_{e0}}T^2$$
(5)

Свойства жидкого железа при изобарическом нагреве (STEOS2)



Уравнения для расчета параметров ударно-волновых процессов

Для расчета ударных адиабат решается система уравнений, выражающих законы сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{D}{D-U} = \frac{V_{00}}{V} \tag{6}$$

$$P = P_0 + \frac{DU}{V_{00}}$$
(7)

$$E - E_0 = \frac{1}{2}(P + P_0)(V_{00} - V)$$
(8)

Для расчета массовой скорости в волне разгрузки берется интеграл вдоль изоэнтропы:

$$U = U_H + \int_{V_H}^{V} \left[-\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S \right]^{1/2} dV$$
(9)

Ударные адиабаты железа, *D*–*U* (STEOS2)



*Ссылки на статьи с экспериментальными данными по ударному сжатию можно найти в базе данных https://ihed.ras.ru/rusbank/

Ударные адиабаты железа, *Р*-р (STEOS2)



*Ссылки на статьи с экспериментальными данными по ударному сжатию можно найти в базе данных https://ihed.ras.ru/rusbank/

Ударные адиабаты железа, *P–U* (STEOS2)



*Ссылки на статьи с экспериментальными данными по ударному сжатию можно найти в базе данных https://ihed.ras.ru/rusbank/

Изоэнтропы разгрузки ударно-сжатых образцов железа (STEOS2)



Модель STEOS3m

$$F(V,T) = F_c(V) + F_a(V,T) + F_e(V,T)$$
(10)

$$F_c(V) = V_{0c} B_{0c} \left(\frac{a_m}{m} \varsigma^m + \frac{a_n}{n} \varsigma^n - \frac{a_m + a_n}{l} \varsigma^l \right) + E_s \tag{11}$$

$$F_a(V,T) = -\frac{3}{2}RT \ln \frac{T^2}{\theta^2 + T_a \sigma^{2/3}T}$$
(12)

$$\theta(V) = \theta_0 \sigma^{2/3} \exp\left[\left(\gamma_0 - \frac{2}{3}\right) \frac{\delta_n + \ln^2 \sigma_m}{\sqrt{\delta_n}} \left(\operatorname{arctg}\left(\frac{\ln \sigma / \sigma_m}{\sqrt{\delta_n}}\right) + \operatorname{arctg}\left(\frac{\ln \sigma_m}{\sqrt{\delta_n}}\right)\right)\right] (13)$$

$$F_e(V,T) = -\frac{1}{2}\beta_{e0}(\sigma + \sigma_e)^{-\gamma_{e0}\operatorname{arctg}(\sigma + \sigma_e)}T^2$$
(14)

$$\operatorname{arctg}(\sigma_e) + \frac{\sigma_e \ln(\sigma_e)}{1 + \sigma_e^2} = 0 \tag{15}$$

Фазовая диаграмма жидкого и газообразного железа (STEOS3m)





Изоэнтропы разгрузки ударно-сжатых образцов железа (STEOS3m)



Выводы

- Получено уравнение состояния жидкой фазы железа по модели STEOS2
- Получено уравнение состояния железа в жидком и газообразном агрегатных состояниях по модели STEOS3m
- Рассчитаны модельные зависимости термодинамических величин в высокоинтенсивных процессах (при изобарическом нагреве мощным импульсом тока, ударном сжатии и изоэнтропическом расширении), результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными
- Результаты настоящей работы могут быть использованы в гидродинамическом моделировании процессов при высоких давлениях и температурах

Спасибо за внимание