



РОСАТОМ



ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

# Многофазное уравнение состояния свинца

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

Забабихинские научные чтения

Международная конференция

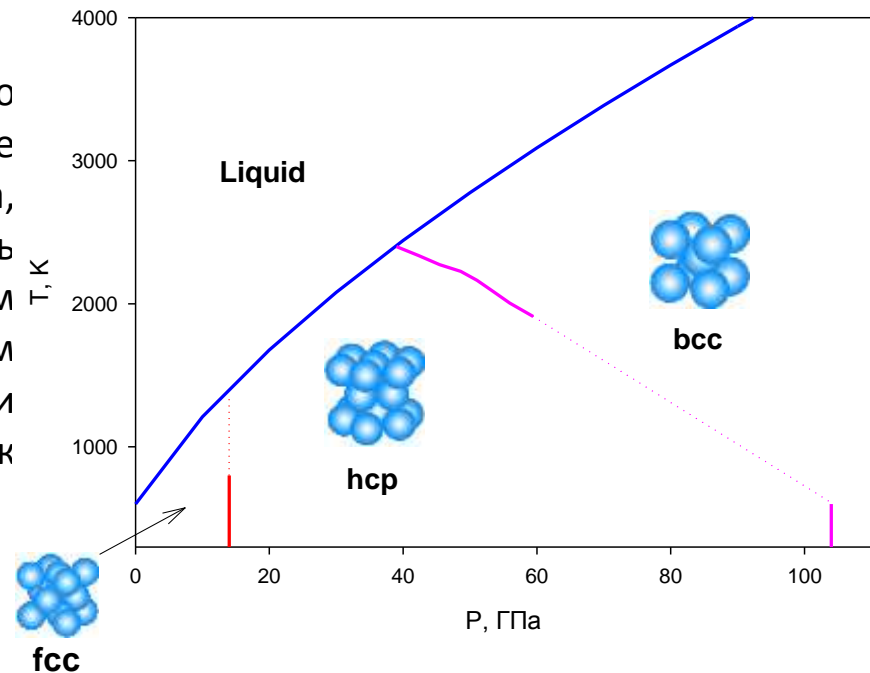
18-24 марта, 2019

Снежинск

# Введение

• Численное моделирование поведения конструкций при воздействии на них интенсивных потоков энергии не может быть осуществлено без наличия уравнения состояния (УРС) адекватно описывающего свойства материалов в широкой области температур и давлений, включающей в себя 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 резким изменением плотности, сжимаемости и других термодинамических характеристик материала.



# Модель УРС



Свободная энергия Гельмгольца записывается в традиционном виде

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

где  $V$  молярный объем,  $T$  температура,  $F_C = E_C$  холодная энергия при  $T=0K$ ,  $F_A$  и  $F_E$  тепловые вклады атомов и термически возбужденных электронов, и  $S_{Tr}T$ -обеспечивает экспериментальное значение скачка энтропии при плавлении.

Холодная энергия записывается в виде

В области сжатия при  $x < 1$ :

$$E_C(V) = E_{0K} - \int_{V_{0K}}^V P_C(V) dV$$

$$2 \quad P_C(y) = 3B_{0K} \frac{1-y}{y^5} \exp[C_0(1-y)] \left\{ 1 + C_1 y(1-y) + C_2 y(1-y)^2 + C_3 y(1-y)^3 \right\}$$

В области растяжения при  $x > 1$ :

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

$$3 \quad P_C(x) = Ax^{-(1+m)} + Bx^{-(1+n)} + Cx^{-(1+k)}$$

где  $x = V/V_{0K}$ ,  $y = x^{1/3}$ ,  $V_{0K}$  и  $B_{0K}$  молярные объем и модуль объемного сжатия при  $x=1$  и  $T=0K$

# Модель УРС



Тепловая составляющая в дебаевском приближении:

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

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

Функция Грюнайзена принимается в виде эмпирического соотношения:

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

Температура Дебая определяется интегрированием выражения  $\Gamma(V) = -\frac{\partial \ln \theta(V)}{\partial \ln V}$

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

В жидкой фазе тепловая составляющая записывается в виде:

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

# Модель УРС



Электронная компонента свободной энергии<sup>1)</sup>:

8

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

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

$$C_E(V, T) = \frac{3R}{2} \left[ Z + (1-Z)q \frac{x^{N_z}}{(x^{N_z} + x_z^{N_z})} \frac{T_z^{M_z}}{(T_z^{M_z} x^{s_e} + T_z^{M_z})} \right] \exp\left(-\frac{\tau_i}{T}\right)$$

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

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

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

$FE$  при  $T \rightarrow \infty$  стремится к выражению для идеального газа электронов при полной их ионизации

# Расчеты

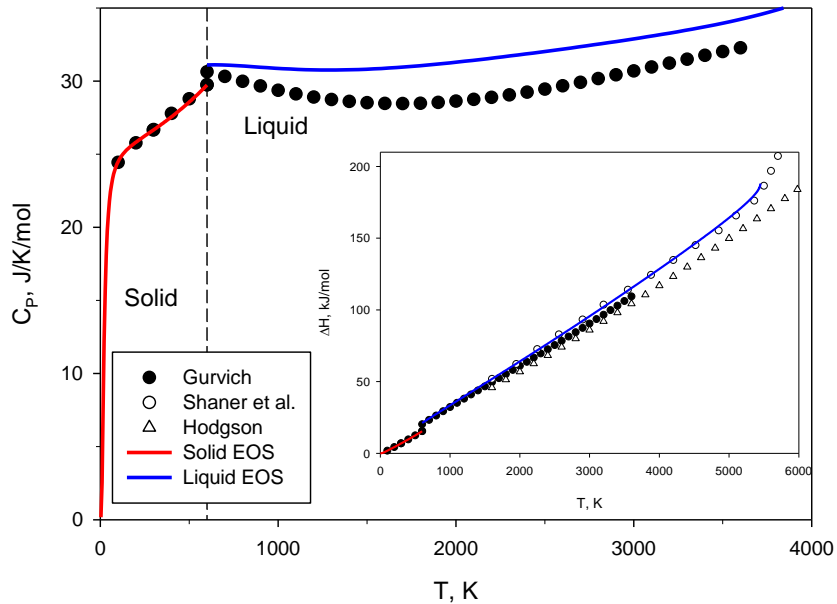


Рис.1. Температурная зависимость теплоемкости для твердой и жидкой фаз свинца. На вставке разница энтальпий от температуры.

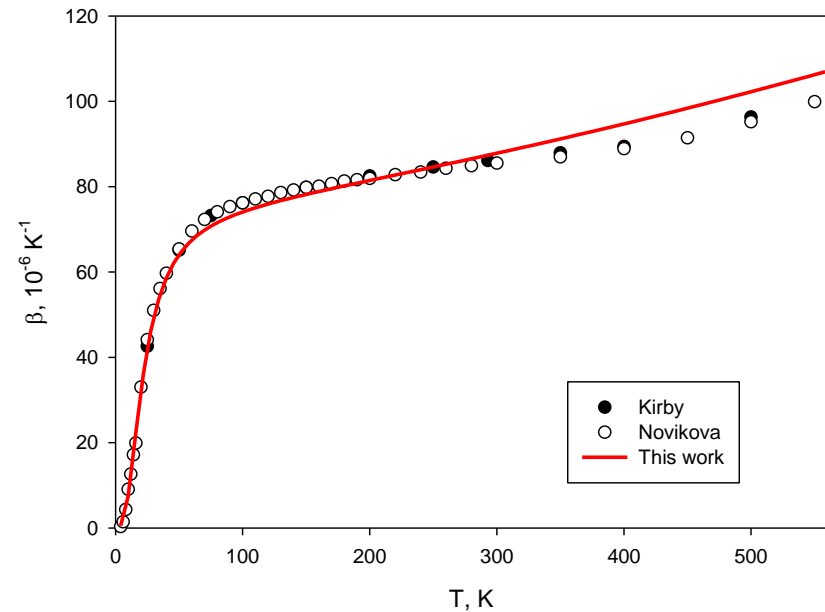


Рис. 2. Температурная зависимость объемного коэффициента теплорасширения свинца

# Расчеты

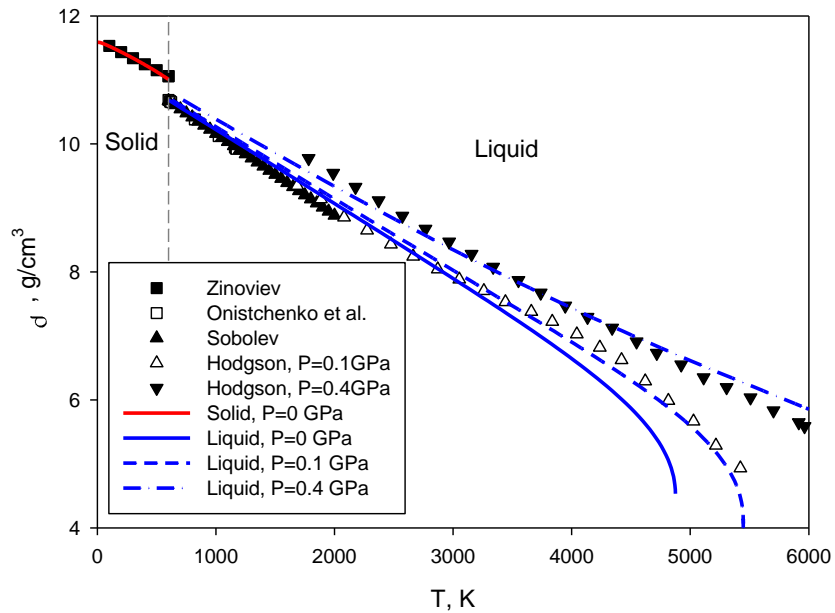


Рис. 3. Плотность свинца от температуры при различных давлениях

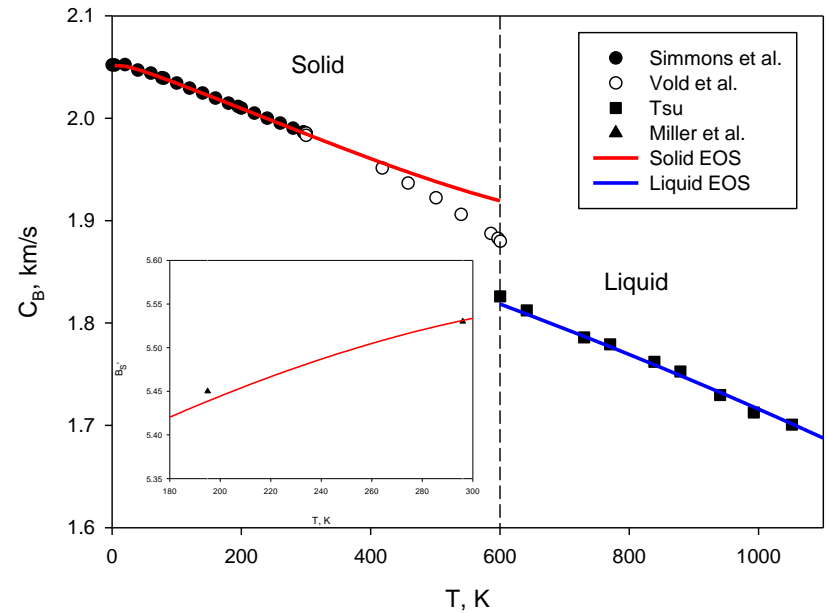


Рис.4. Температурная зависимость объемной скорости звука. На вставке производная изотермического модуля объемного сжатия по давлению

# Расчеты

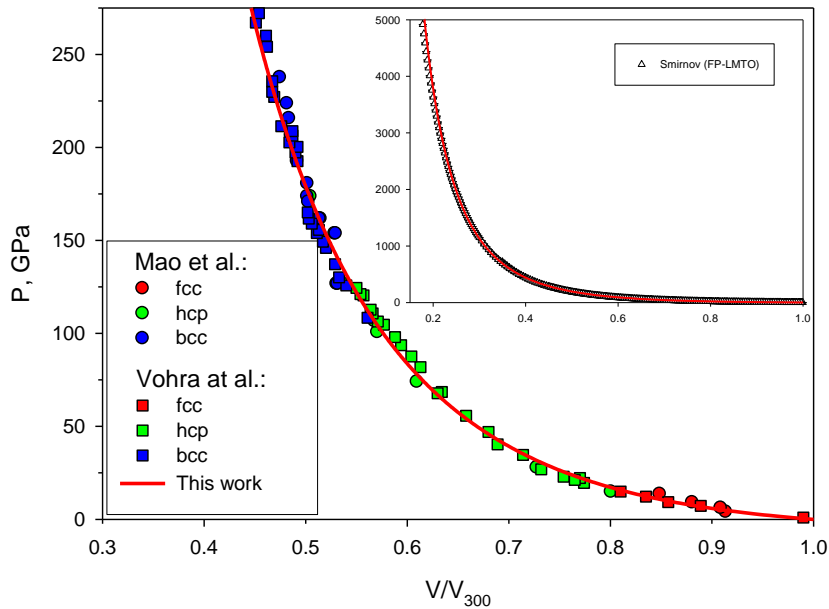


Рис. 5. Изотермическое сжатие свинца при  $T=300\text{K}$ . На вставке холодная кривая.

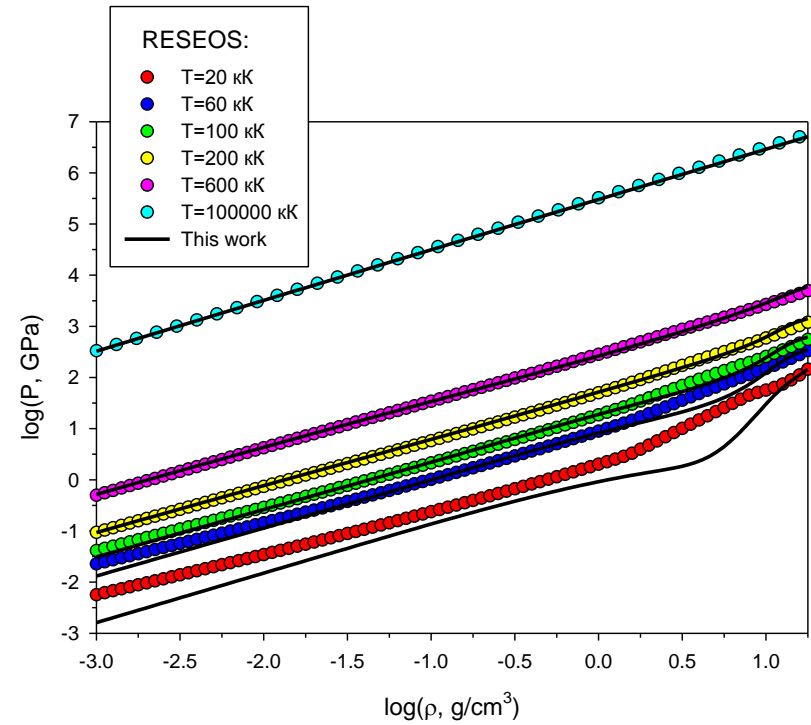


Рис. 6. Изотермы растяжения жидкости в сравнении с расчетами по модели Либермана(RESEOS)



# Расчеты



	Плотность, г/см <sup>3</sup>	Давление, ГПа	Температура, К
Начало плавления	16.628	52.55	3004.12
Завершение плавления	17.399	70.82	3556.4

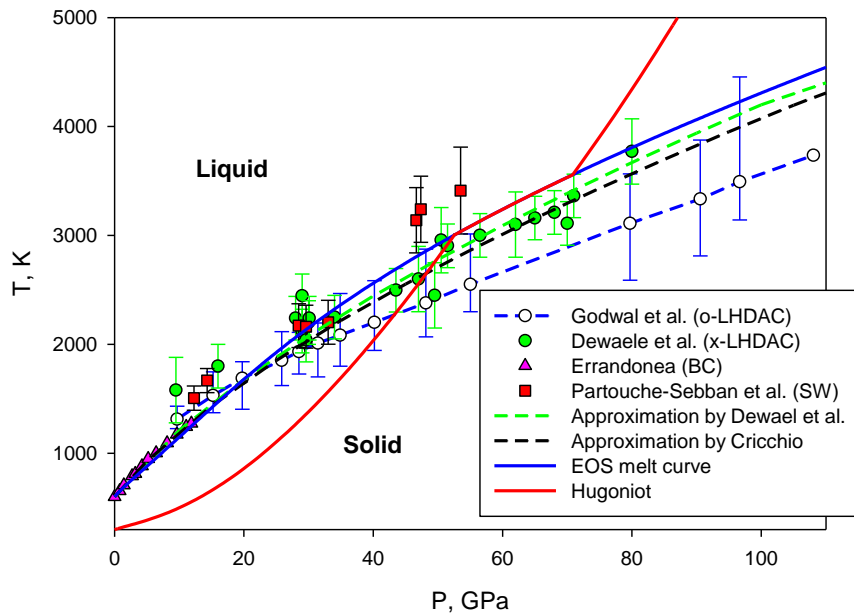


Рис 7. Фазовая диаграмма свинца

$T_{кр}$ , К	$P_{кр}$ , ГПа	$\rho_{кр}$ , г/см <sup>3</sup>	Источник
4980	0.184	3.25	Закон соответственных состояний
5158	0.225	3.06	Мягкие сферы
4663	0.208	3.1	Твердые сферы
5300	0.17	2.31	Ударные волны
5300-6000	0.2-0.3	3.06-3.15	Эксперимент
5996	0.17	3.29	Данная работа

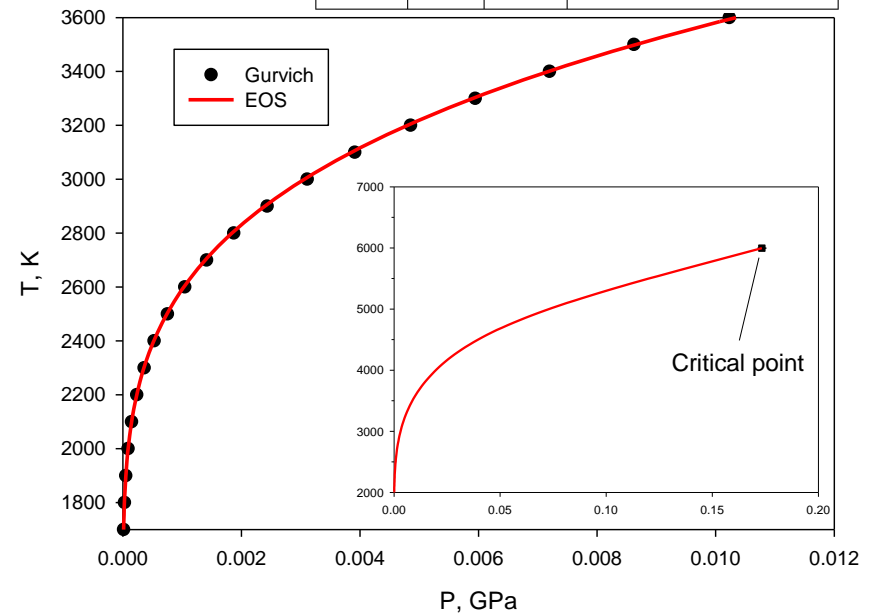


Рис. 8. Кривая равновесия жидкость-пар и критическая точка (вставка).

# Расчеты

	Плотность, г/см <sup>3</sup>	Давление, ГПа	Температура, К
Начало плавления	16.628	52.55	3004.12
Завершение плавления	17.399	70.82	3556.4

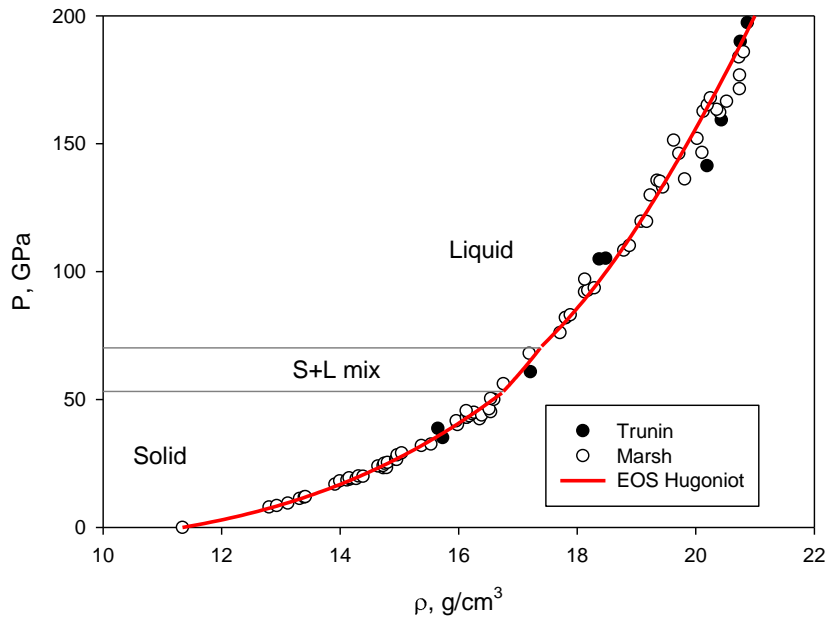


Рис. 9. Ударная адиабата свинца до 200ГПа

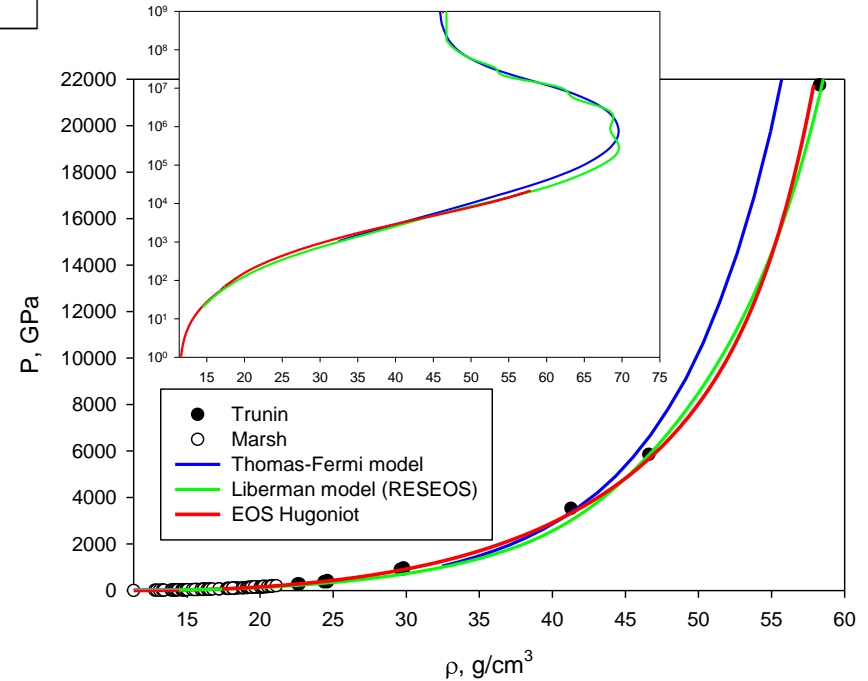


Рис. 10. Ударная адиабата в экспериментально исследованной области давлений.

# Расчеты

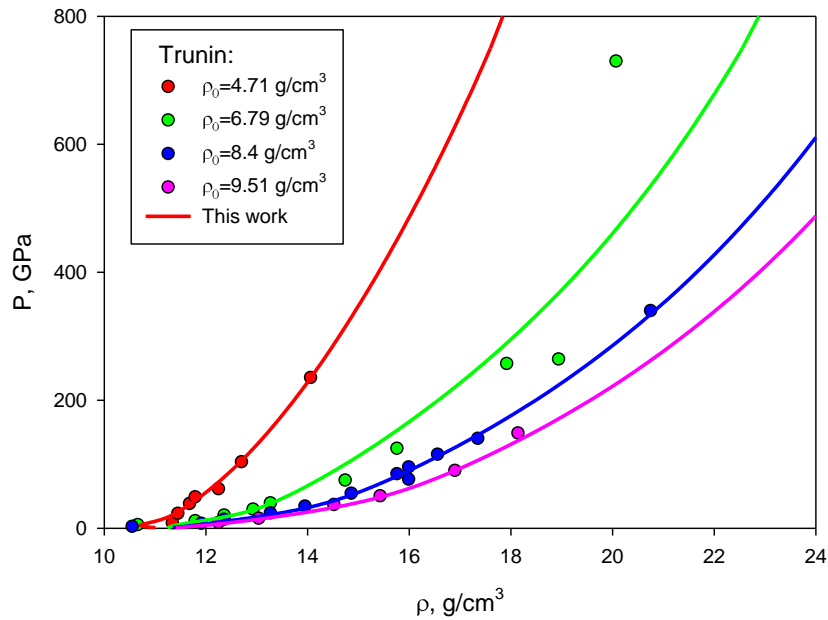


Рис. 11. Ударные адиабаты пористых образцов

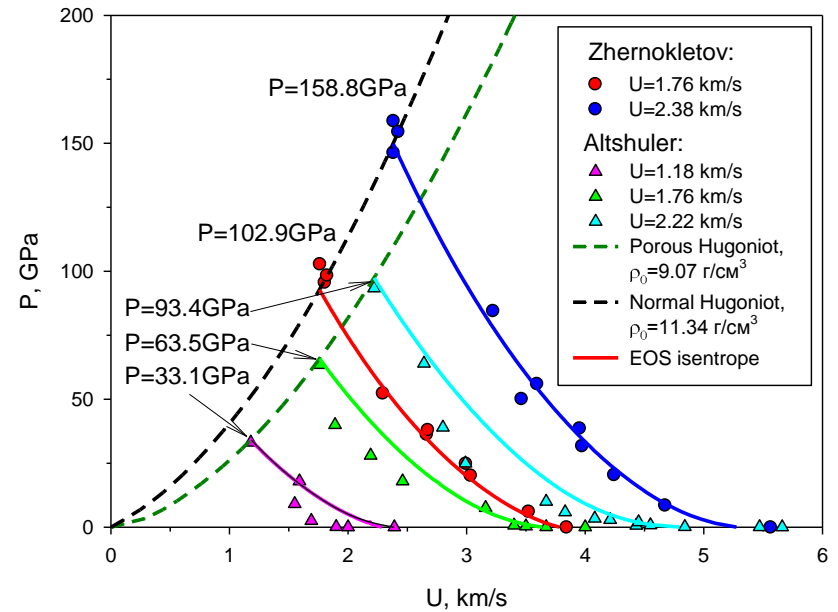


Рис. 12. Сплошная и пористая ударные адиабаты и изентропы разгрузки

# Заключение



Построено двухфазное уравнение состояния свинца с учетом испарения, согласованное как с имеющимися в настоящее время статическими и динамическими экспериментальными данными в области умеренных температур и давлений существования твердых фаз, так и в области высоких давлений ударного сжатия до 22 ТПа. Кроме того в области высоких давлений уравнение состояния согласовано с расчетами по моделям ТФПК и Либермана.

Наличие газовой асимптотики в уравнении состояния жидкости позволило описать кривую равновесия жидкость-пар и рассчитать координаты критической точки, согласующиеся с литературными данными.