

11. Медведев А.Б. Уравнение состояния и коэффициенты переноса аргона на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса до давлений 100ГПа // ФГВ, 2010, т. 46, №4, с. 116-126.
12. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., Физматлит, 1963., 632 стр. с илл.

НЕРАВНОВЕСНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ПММА НА УДАРНОЙ ВОЛНЕ. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВТОРОЙ ФАЗЫ ПММА ПРИ НЕРАВНОВЕСНОМ ФАЗОВОМ ПРЕВРАЩЕНИИ

И.В. Кузьмицкий

РФЯЦ ВНИИЭФ, Саров, Россия

В работах автора был развит новый подход к описанию фазового превращения, как в инертных материалах, так и применительно к описанию детонации как процесса ФП [1-9]. Отличительной особенностью этого подхода являются детали, подробнее изложенные в работе [10].

Ниже приводится система уравнений для произвольного нестационарного газодинамического течения сплошной среды, в которой происходит неравновесное фазовое превращение (ФП).

$$\frac{dv}{dt} - v \cdot \text{div} \vec{U} = 0 \quad (a)$$

$$\frac{d\vec{U}}{dt} + v \cdot \vec{\nabla} P_Q = 0 \quad (b)$$

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{dt} = \frac{1}{T} \cdot \left(\frac{d\varepsilon^{(1)}}{dt} + P \cdot \frac{dv^{(1)}}{dt} \right) \quad (c)$$

$$\frac{d\sigma^{(2)}}{dt} = \frac{1}{T} \cdot \left(\frac{d\varepsilon^{(2)}}{dt} + P \cdot \frac{dv^{(2)}}{dt} \right) \quad (d)$$

$$P_Q \equiv P - T \cdot \left(\frac{d\sigma}{dv} \right) \quad (e)$$

$$v \equiv (1 - \alpha) \cdot v^{(1)} + \alpha \cdot v^{(2)} \quad (f) \quad (1)$$

$$\sigma \equiv (1 - \alpha) \cdot \sigma^{(1)} + \alpha \cdot \sigma^{(2)} \quad (g)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = K(\alpha, P, v) \quad (h)$$

$$v^{(2)} = v^{(2)}(P, T) \quad (k)$$

$$v^{(1)} = v^{(1)}(P, T) \quad (l)$$

$$\frac{\partial v}{\partial T} + \frac{\partial \sigma}{\partial P} = 0 \quad (m)$$

В системе уравнений (1) использованы общепринятые обозначения для физических параметров.

Система уравнений газовой динамики для вещества, испытывающего на ударной волне *неравновесное фазовое превращение*, ранее было получено с замыкающим условием, приведенным в [5,6]:

$$\Phi^{(2)} - \Phi^{(1)} = -v \cdot dP/d\alpha \quad (a) \quad dH = dQ = T \cdot d\sigma \quad (b) \quad (2)$$

Условие (2) было получено как *приближённое*, в предположении выполнения равенства (2-b). В настоящее время получено и строго доказано, что *точный критерий*, замыкающий полную газодинамическую систему для неравновесного фазового процесса, имеет вид:

$$\partial v / \partial T + \partial \sigma / \partial P = 0 \quad (3)$$

Условие (3) использовано в системе уравнений (1), уравнение (m). С помощью условия (3) и ударной адиабаты для первой фазы вещества в переменных (P, T) была получена система двух уравнений (4), которая определила для ударной волны **минимальное** ударное нагружение вещества, начиная с которого фазовое превращение будет проходить **по неравновесному сценарию** (точка на рисунке 1).

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial v^{(1)}(P, T)}{\partial T} \right) = 0 \\ \varepsilon^{(1)}(P, T) - \varepsilon^{(1)}(P_0, T_0) = \quad \Rightarrow (P_{bN}, T_{bN}) \\ \frac{(P + P_0)}{2} \cdot (v_0 - v^{(1)}(P, T)) \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} v^{(1)}(P_{bN}, T_{bN}) \equiv v_{bN}^{(1)} \\ D_{bN} = v_0 \cdot \sqrt{\frac{P_{bN} - P_0}{v_0 - v_{bN}^{(1)}}} \end{cases} \quad (5)$$

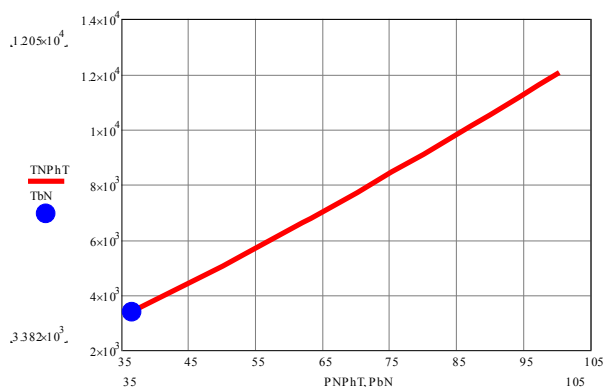


Рисунок 1. Фазовая диаграмма неравновесного фазового превращения в ПММА. Температура T в $^{\circ}K$, давление P в ГПа на фронте ударного скачка

Для ПММА это точка с такими начальными параметрами для ударной волны (рисунок 1), выше которых за ударным скачком будет развиваться неравновесное фазовое превращение:

$$\left\{ P_{bN} = 36.94 \text{ ГПа}, T_{bN} = 3382 \text{ }^{\circ}K, v_{bN}^{(1)} = 0.4498 \text{ см}^3 / \text{г}, D_{bN} = 8.129 \text{ км/с}, U_{bN} = 3.809 \text{ км/с} \right\} \quad (6)$$

Основной блок молекул **мономера** ПММА можно записать так: $H_8C_5O_2$. При этом для ПММА при неравновесном ФП возможны два канала образования новых молекул:



1 Уравнение состояния ПММА для неравновесного фазового превращения

Применяя метод "Нескольких виртуальных экранов" [4], получим наборы параметров для двух точек – точки начала неравновесного фазового превращения в ПММА (индекс b) и точки старта ударной адиабаты второй фазы ПММА в состоянии с новым составом молекул после неравновесного фазового превращения (индекс e).

Таблица 1. Параметры точки начала неравновесного ФП и точки старта ударной адиабаты 2 фазы для ПММА в процессе неравновесного ФП

Параметры точки начала ФП		Точка старта неравновесной адиабаты 2 фазы	
D_{bN} , км/с	8.167	D_{bN} , км/с	8.167
P_{bN} , ГПа	37.055	P_{eN} , ГПа	38.606
U_{bN} , км/с	3.85	U_{eN} , км/с	3.973
ρ_{bN} , г/см ³	2.232	ρ_{eN} , г/см ³	2.298
V_{bN} , см ³ /г	0.448	V_{eN} , см ³ /г	0.43522

Для сравнения приведём аналогичные параметры для *равновесного фазового превращения в ПММА* из [4].

Таблица 2. Параметры точки начала равновесного ФП и точки старта равновесной адиабаты 2 фазы

Параметры точки начала ФП		Точка старта равновесной адиабаты 2 фазы	
D_F , км/с	3.332	D_F , км/с	3.332
P_{bSW} , ГПа	1.43	P_{eSW} , ГПа	1.838
U_{bSW} , км/с	0.364	U_{eSW} , км/с	0.489
ρ_{bSW} , г/см ³	1.325	ρ_{eSW} , г/см ³	1.383
V_{bSW} , см ³ /г	0.755	V_{eSW} , см ³ /г	0.723

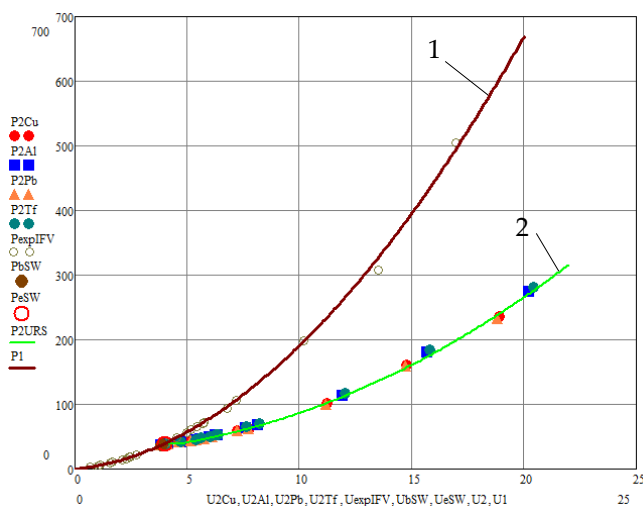


Рисунок 2. Зависимости $P(U)$ для первого (круги, линия 1) и второго фазовых состояний ПММА. P в ГПа, скорости в км/с. Линия 2– расчёт по уравнению состояния второй фазы – таблица 3

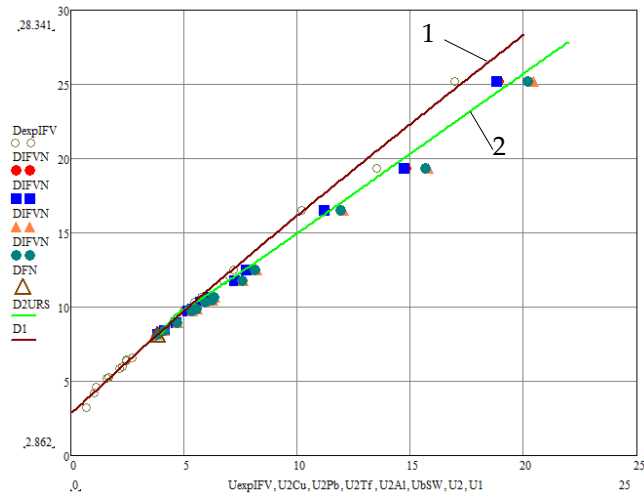


Рисунок 3. Зависимости $D(U)$ для первого (круги, линия 1) и второго фазовых состояний ПММА. Величины скоростей в км/с. Линия 2 – расчёт по уравнению состояния второй фазы – таблица 3

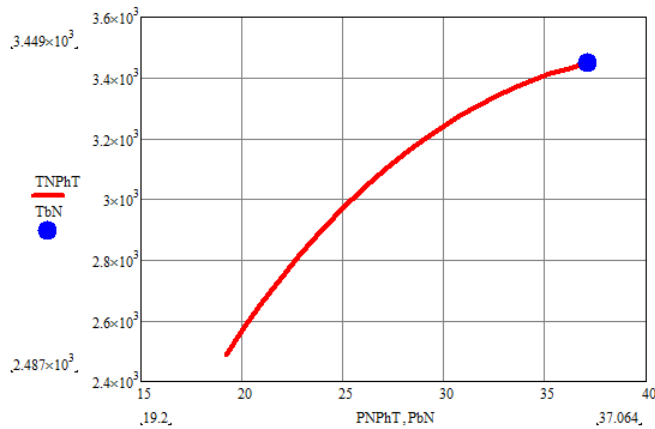


Рисунок 4. Зависимость температуры в ОК от давления P в ГПа на ударной волне для неравновесного фазового превращения. Температура и давление снижаются

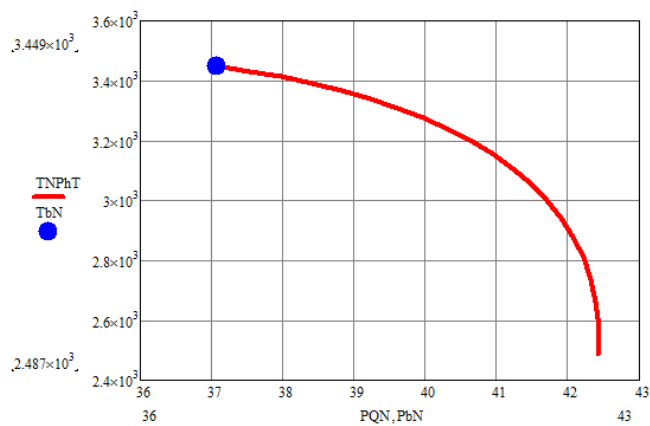


Рисунок 5. Зависимость температуры в ОК от полного давления PQ в ГПа на ударной волне для неравновесного фазового превращения. Температура снижается, а полное давление PQ растёт

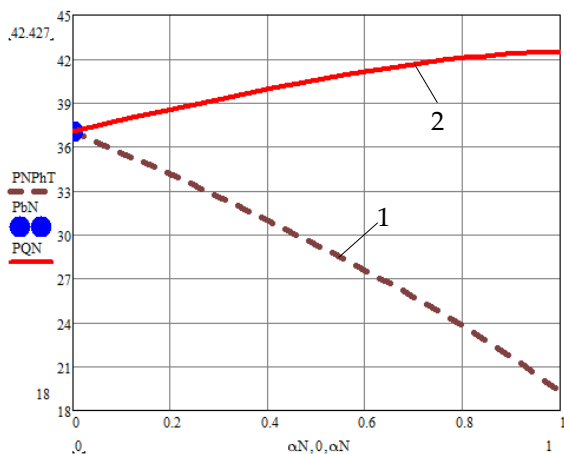


Рисунок 6. Зависимость давления P в ГПа (пунктир 1) и полного давления P_Q с учётом калорийности фазового превращения (линия 2) от массовой доли второй фазы

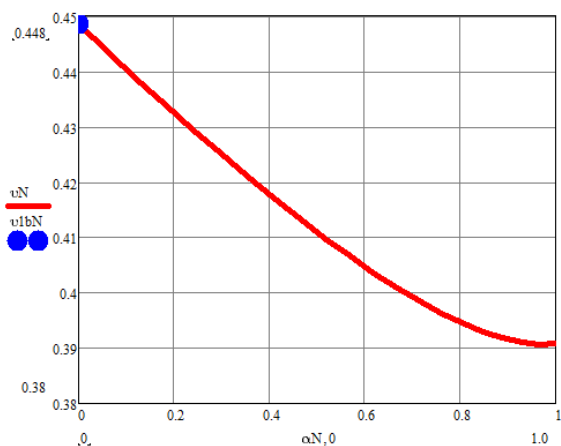


Рисунок 7. Удельный объём ГФТ в см³/г при неравновесном фазовом превращении на ударной волне сжатия в зависимости от массовой доли второй фазы

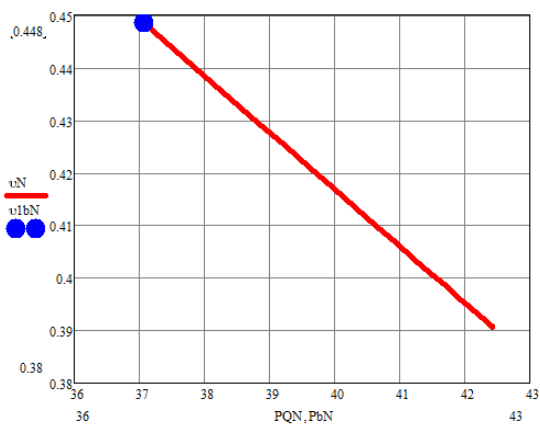


Рисунок 8. Удельный объём ГФТ в см³/г при неравновесном фазовом превращении на ударной волне в зависимости от давления P_Q в ГПа

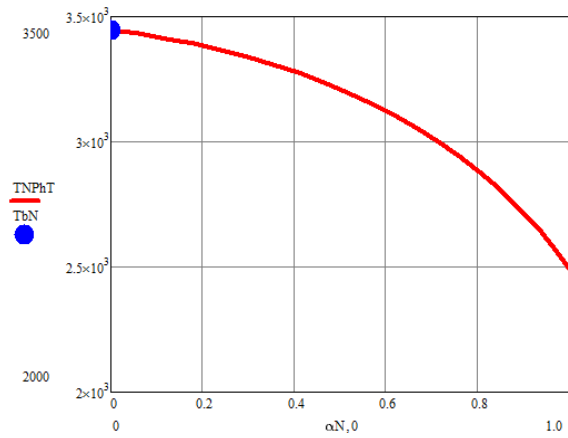


Рисунок 9. Поведение температуры в $^{\circ}\text{K}$ при неравновесном фазовом превращении в ударной волне в зависимости от массовой доли второй фазы

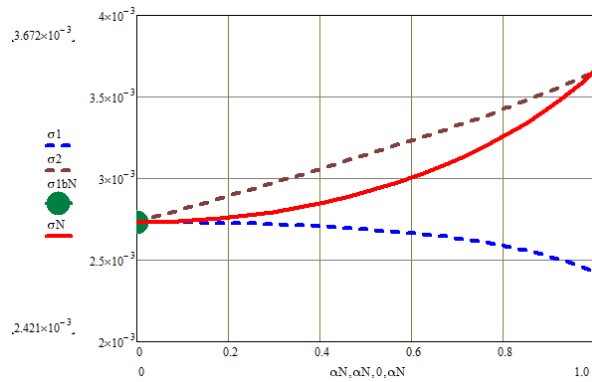


Рисунок 10. Поведение удельных энтропий в $\text{KДж/г}\cdot^{\circ}\text{K}$ первой и второй фазы и полной энтропии при неравновесном фазовом превращении на ударной волне в зависимости от массовой доли второй фазы

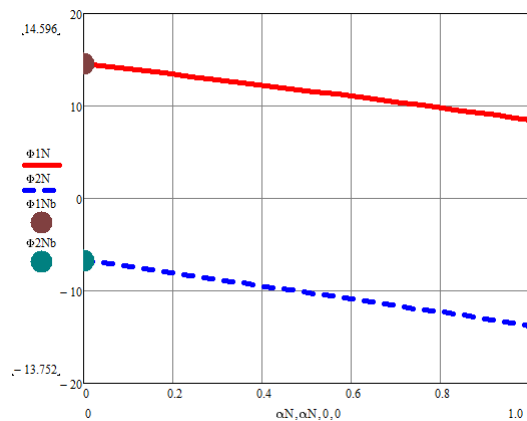


Рисунок 11. Поведение термодинамических потенциалов Гиббса в KДж/г фазовых фракций ПММА при неравновесном фазовом превращении на ударной волне в зависимости от массовой доли второй фазы

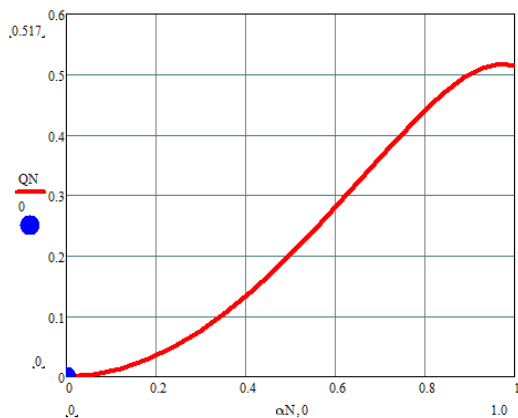


Рисунок 12. Калорийность Q_N в КДж/г неравновесного фазового превращения на ударной волне в зависимости от массовой доли второй фазы

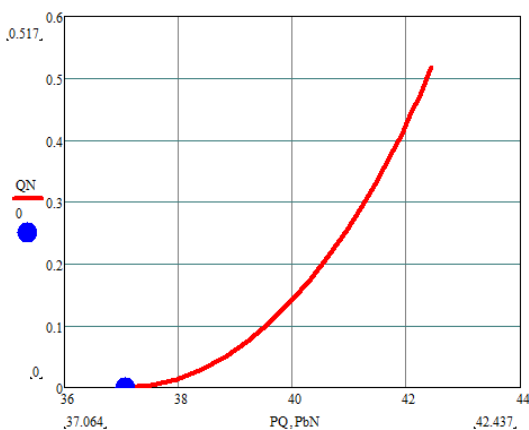


Рисунок 13. Калорийность Q_N в КДж/г неравновесного фазового превращения на ударной волне в зависимости от величины полного давления P_Q в ГПа

Из рисунка 6 видно, что по мере неравновесного фазового превращения в ПММА происходит снижение давления P и *рост полного с учётом калорийности давления P_Q . Удельный объём снижается*. Другими словами – неравновесный фазовый процесс в ПММА при параметрах ударного скачка (6) реализует *волну сжатия*, с небольшой положительной калорийностью Q за ударным скачком – рисунки 12 и 13. Из рисунка 11 видно, что процесс фазового превращения ПММА действительно неравновесный – термодинамические потенциалы Гиббса различаются, причём с самого начала фазового превращения. То, что полное давление P_Q выше давления без учёта калорийности P , указывает на выделение тепла Q при неравновесном фазовом превращении на ударной волне сжатия. Калорийность неравновесного фазового превращения в точке завершения ФП достигает величины $Q = 0.52$ КДж/г. В последней точке фазового превращения при $\alpha = 1.0$ условие Жуге не реализуется:

$$\{D = 8.168 \text{ км/с}, U = 4.402 \text{ км/с}, C = 5.245 \text{ км/с}\} \Rightarrow D < U + C$$

Поэтому, любая волна разрежения, идущая сзади такой ударной волны с неравновесным ФП, сможет догнать её и сорвать режим энерговыделения. И вообще, снизить давление на скачке до критической величины из списка параметров (6). Ниже этих величин процесс *неравновесного* фазового превращения с положительной калорийностью Q переходит в процесс *равновесного* фазового перехода.

Список литературы

1. Кузьмицкий И.В., М.В. Жерноклетов, В.В. Комиссаров. Новый подход к построению уравнения состояния вещества с фазовым переходом на фронте ударной волны. Уравнение состояния фенилона//Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48, № 4. УДК 539.89. С. 103-113//Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2012. Vol. 48, № 4. УДК 539.89. PP. 465-474.
2. Кузьмицкий И.В. Гетерогенная физическая точка. Равновесный, неравновесный и квазиравновесный режим фазового превращения. Основные уравнения эволюции// International Conference "Shock Wave in Condensed Matter". St.-Petersburg-Novgorod, Russia. 2010. С. 251-255//XIII Харитоновские тематические научные чтения. Сб. тезисов докладов. Саров, 2011. С.137-141.// Труды XIII Харитоновских тематических научных чтений. Саров, 2011. С. 278-285.
3. Кузьмицкий И.В. Система уравнений для ударной адиабаты в области фазового перехода и её решение// International Conference "Shock Wave in Condensed Matter". St.-Petersburg-Novgorod, Russia. 2010. С. 255-259//XIII Харитоновские тематические научные чтения. Сб. тезисов докладов. Саров, 2011. С.141-146// Труды XIII Харитоновских тематических научных чтений. Саров. 2011. С. 285-292.
4. Кузьмицкий И.В. Фазовое превращение в бериллии. Метод нескольких виртуальных экранов. Труды международной конференции XVII Харитоновские тематические научные чтения. "Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны". Саров. 2015. С. 212-234.
5. Кузьмицкий И.В. Подвижная точка Жуге. Детонация как фазовый переход//LAP LAMBERT Academic Publishing. 2017. 452 с.
6. Кузьмицкий И.В. Подвижная точка Жуге в классической теории детонации. Детонация как фазовый переход//ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ. Монография. Саров. 2018. 317 с.
7. Кузьмицкий И.В. Пластифицированный ТЭН. Принцип Гленсдорфа-Пригожина при определении детонационных параметров в модели "Детонация как фазовое превращение". Труды международной конференции XIX Харитоновские тематические научные чтения. "Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны". Саров. 2017. Том 1. С. 78-85.
8. Кузьмицкий И.В. Затухание ударной волны с фазовым превращением за фронтом ударного скачка. Труды международной конференции XIX Харитоновские тематические научные чтения. "Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны". Саров. 2017. Том 1. С. 320-324.
9. Кузьмицкий И.В. Моделирование механизма откола в материалах с фазовым превращением. Применение к бериллию. Труды международной конференции XIX Харитоновские тематические научные чтения. "Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны". Саров. 2017. Том 1. С. 414-422.
10. Кузьмицкий И.В. Модель плавления вещества на ударной волне на основе уравнений фазового превращения. Плавление бериллия. Труды международной конференции XXI Харитоновские тематические научные чтения. "Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны". Саров. 2019. Настоящее издание.

УДАРНО-ВОЛНОВАЯ СЖИМАЕМОСТЬ ГАЗООБРАЗНОГО ДЕЙТЕРИЯ

Г.А. Козлов, Е.Н. Богданов, М.В. Жерноклетов, А.В. Родионов, М.Е. Шаврин,
А.В. Федоров, Е.А. Чудаков, Д.А. Калашников, И.С. Гнуттов, А.О. Яговкин

РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, Россия

Введение. Исследования поведения газов в экстремальных состояниях представляют интерес с точки зрения верификации широкодиапазонных уравнений состояния. Эти уравнения состояния необходимы, например, при решении проблемы осуществления инерциального термоядерного