УДК 539.3

С. А. Бордзиловский, М. С. Воронин, С. М. Караханов Расчет температуры ударного сжатия полимерных материалов^{*}

S. A. Bordzilovsky, M. S. Voronin, S. M. Karakhanov Shock Compression Temperature Calculation for Polymer Materials

Известно достаточно много моделей, описывающих ударно-волновое сжатие полимерных материалов. В них построены уравнения состояния полимерных материалов, характеризующих состояние сред в широком диапазоне изменения параметров. В расчетах по таким моделям достаточно хорошо воспроизводятся экспериментальные данные по эволюции кинематических параметров в процессах ударного сжатия. При этом расчет термодинамических параметров, в частности, температуры ударно сжатого материала, по этим моделям оставляет желать лучшего. Это осложняется и тем обстоятельством, что экспериментальные методы измерения температуры зачастую дают не согласующиеся между собой результаты. Перечисленные обстоятельства делают актуальной разработку уравнений состояния и моделей, позволяющих адекватно описывать не только кинематические, но и термодинамические параметры ударно-волнового сжатия полимеров.

В данной работе такая модель строится на основе максвелловских представлений о механизмах необратимых деформаций и приводятся данные об измерении яркостной температуры ряда ударно сжатых полимеров. Проведено сравнение результатов расчета температуры за фронтом ударной волны в полиметилметакрилате, фторопласте и эпоксидной смоле с полученными экспериментальными данными и расчетами по известным уравнениям состояния. Решен ряд задач ударно-волнового деформирования полимеров. Сравнение результатов расчетов с соответствующими экспериментальными данными показывает применимость построенной модели для описания ударно-волновых процессов в полимерах.

Ключевые слова: полимер, модель, уравнение состояния, ударно-волновые процессы, температура.

DOI 10.14258/izvasu(2014)1.1-42

Существует ряд моделей, описывающих ударноволновое сжатие полимерных материалов. Для некоторых полимеров построены уравнения состояния, характеризующих свойства сред в широком There are a lot of well-known shock compression models for polymer materials that exploit equations of state for polymeric media with wide ranges of parameters. The models are in a good agreement with experimental data regarding the evolution of kinematic parameters of the shock compression process. However, thermodynamic parameters calculation, e.g. shock compression temperature, is less than perfect. Besides, experimental approaches for measuring the temperature are not consistent with each other, thus complicating even more the issue. Under these circumstances, development of appropriate equations of state and models for accurate evaluation of kinematic and thermodynamic parameters of polymer shock compression is of great importance.

The model developed and proposed in this paper is based on Maxwell concepts of nonreversible deformation mechanisms and experimental measurement of brightness temperatures of several shock compressed polymers. Good agreement is obtained between calculations of temperature behind shock wave front and experimental measurements for polymethylmethacrylate, polytetrafluoroethylene and epoxy resin. The model calculations are compared with results calculated with other well-known equations of state, and applicability of the proposed model is demonstrated. Several problems of polymer shock wave deformation are solved.

Key words: polymer, model, equation of state, shock wave processes, temperature.

диапазоне изменения параметров [1, с. 5203; 2, с. 1002; 3, с. 104]. При этом расчеты по разным моделям не всегда дают согласующиеся результаты. В особенности это касается расчета температуры

^{*} Работа выполнена при поддержке Интеграционного проекта СО РАН № 64 и гранта РФФИ (проект №12-01-00726-а).

ударного сжатия. Ситуация осложняется и тем обстоятельством, что набор экспериментальных данных по измерению температуры весьма ограничен, а различные экспериментальные методы измерения температуры зачастую дают не согласующиеся результаты. Перечисленные обстоятельства делают актуальной разработку уравнений состояния и моделей, позволяющих адекватно описывать не только кинематические, но и термодинамические параметры ударно-волнового сжатия полимеров.

В данной работе такая модель строится на основе максвелловских представлений о механизмах необратимых деформаций. Развиваемый подход апробирован на построении моделей поликристаллических и полимерных материалов [4, с. 113]. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными.

При построении уравнения состояния используется классический подход Ми-Грюнайзена, основной сутью которого является представление термодинамического потенциала в виде суммы вкладов от разных составляющих:

$$F = F_{x} + F_{d} + F_{a} + F_{a}, \qquad (1.1)$$

где F_x — упругая (или холодная) энергия среды вдоль нулевой изотермы, т. е. при $T = 0 K; F_d$ — девиаторная составляющая энергии; F_a — энергия теплового возбуждения атомов (или «решетки»); F_e — энергия теплового возбуждения электронов. Свободная энергия представляется как функция первого и второго инвариантов тензора деформаций $F = F(\delta, D, T)$. Приведем вид составляющих энергии, использовавшихся в данной работе.

$$F_x\left(\delta
ight) = V_0\left(rac{a\delta^{m-1}}{m-1} + rac{b\delta^{n-1}}{n-1}
ight) - F_{x0}$$
, из чего следует

 $P_x(\delta) = a\delta^m + b\delta^n - P_{x0}$, (1.2) где *a*, *b*, *m*, *n* — интерполяционные константы; F_{x0} , P_{x0} — постоянные, определяемые из условий $F_x(l) = 0$, $P_x(l) = 0$. Значения интерполяционных констант в (1.2) находятся с привлечением данных [5].

В качестве девиаторного слагаемого использована линейная зависимость от второго инварианта тензора деформаций. Коэффициентом пропорциональности служит аппроксимация поперечной скорости звука (или модуля сдвига):

$$F_d(\delta, D) = 2c_\perp^2 \delta^{\xi_0} D, \qquad (1.3)$$

где c_{\perp} — поперечная скорость звука; ξ_0 — интерполяционная константа.

Выбор выражения для вклада от теплового возбуждения атомов и молекул основывается на классических представлениях с учетом особенностей колебательного спектра полимеров [1, с. 5203]. Представим *F*_a в виде трех слагаемых, одно из которых описывает вклады акустической части спектра, и суммы из двух, описывающих вклады от оптической части спектра.

$$F_a(\delta,T) = R_\mu T \sum_{i=1}^3 N_i \ln\left(1 - e^{-x_i}\right) , \qquad x_i = \frac{\Theta_i(\delta)}{T} ,$$

$$\Theta_i = \Theta_{0i} \delta^{\gamma_{0i}} , \qquad (1.4)$$

В (1.4) R_{μ} – универсальная газовая постоянная, деленная на молярную массу; Θ_{0i} — характеристические температуры, определяемые экспериментально; γ_{0i} — имеют смысл аналогов коэффициента Грюнайзена для соответствующих колебательных мод; N_i — интерполяционные константы, удовлетворяющие условию $\Sigma N_i = N$, где N — полное число колебательных мод.

В качестве слагаемого, описывающего вклад в энергию от теплового возбуждения электронов, использована функция, по виду аналогичная слагаемому из суммы (1.4):

$$F_{e}(\delta,T) = TN_{e} \ln(1 - e^{-x_{e}}), \ x_{e} = \frac{\Theta_{e}(\delta)}{T},$$
$$\Theta_{e} = \Theta_{0e} \delta^{\gamma_{0e}}, \qquad (1.5)$$

где N_e , Θ_{0e} , γ_{0e} — интерполяционные константы, определяемые по данным температуры за фронтом мощных ударных волн, если таковые имеются.

Зависимость для времени релаксации касательных напряжений примем в форме:

$$\begin{cases} U_i = U_{i0} - \alpha_{i0}\hat{\sigma} + \alpha_{i1}(\dot{\varepsilon}) |T - T_0|^{n_i} \\ \tau(\hat{\sigma}, T) = \sum_i \tau_i = \sum_i \tau_{i0} \exp \frac{U_i}{RT}, \end{cases}$$
(1.6)

где U_{i0} — энергия активации в начальном недеформированном состоянии; α_{i0} — активационный объем; α_{i1} — коэффициент упрочнения/разупрочнения; τ_{i0} — среднее время жизни кинетической единицы в равновесном состоянии, до перехода в новое равновесное состояние; $\hat{\sigma}$ — интенсивность касательных напряжений; $\dot{\varepsilon}$ – скорость деформации.

Для определения параметров ВРКН использован метод, применявшийся в [4, с. 113].

В экспериментах измерялась яркостная температура ударно сжатых полиметилметакрилата (ПММА), фторопласта (ПТФЭ) и эпоксидной смолы EC141 NF. Схема постановки экспериментов показана на рисунке 1.



Рис. 1. Схема эксперимента по измерению яркостной температуры

Ударные волны в мишенях (пластинах толщиной 5÷10 мм) из исследуемого материала генерировались ударниками из Д16Т толщиной 3÷6 мм, разогнанными продуктами взрыва до скорости 3.7÷6 км/с, через экран из Д16Т толщиной 3÷5 мм. Для измерения яркостной температуры проводилось сравнение спектральных светимостей эталонного источника и ударно-сжатого образца при идентичной геометрии оптической схемы, одинаковой чувствительности фотокатода и усилении фотоумножителя (ФЭУ). Тепловое излучение падало на торцы пучка световодов, располагавшихся на расстоянии 50 мм от поверхности образца, и по световодам длиной 10м передавалось из взрывной камеры к фотоумножителям.

На рисунке 2 показаны расчеты и экспериментальные измерения температуры за фронтом ударной волны в ПММА: 1 — расчет по УрС данной работы: 2 — расчет по УрС [2, с. 1002]; 3 — расчет по УрС [3, с. 104]; 4 — [6, с. 641]; 5 — результаты данной работы; 6 — [7, с. 1921].



Рис. 2. Температура в ударно-сжатом ПММА

На рисунке 3 показаны расчеты и экспериментальные измерения температуры за фронтом ударной волны в эпоксидной смоле: 1 — расчет по УрС данной работы; 2 — расчет по УрС [8, с. 138]; 3 — оценка, сделанная в [9]; 4 — результаты данной работы.



Рис. 3. Температура в ударно-сжатой эпоксидной смоле



Рис. 4. Температура в ударно-сжатом ПТФЭ

На рисунке 6 показаны расчеты и экспериментальные измерения температуры за фронтом ударной волны в ПТФЭ: 1 — расчет по УрС данной работы; 2 — расчет по УрС [6]; 3 — расчет при постоянной теплоемкости $c_v = 18R_{\mu}T (c_v$ при высоких температурах); 4 — расчет при постоянной теплоемкости $c_v = 0.65 \cdot 18R_{\mu}T (c_v$ при комнатной температуре); 5 — результат данной работы.



Рис. 5. Распространение и затухание ударного импульса во фторопласте



Рис. 6. Распространение ударного импульса во фторопласте

Для демонстрации возможностей модели описания также и кинематических величин на рисунках 5, 6 показано сравнение результатов расчетов (линии) с экспериментами (символы) [10, с. 118;11, с. 109]. В первом случае (рис. 5) производился удар двухслойной пластины из дюралюминия (4.8 мм) и титана (2 мм) со скоростью 3.5 км/с по дюралюминиевому экрану (4 мм), за которым находилась мишень. Во втором случае (рис. 6) ударником была пластина из дюралюминия (8 мм). Мишень набиралась из отдельных пластин, между которыми находились четыре манганиновых датчика давления.

Результаты данной работы говорят о применимости построенной модели для расчета параметров ударно-волнового деформирования полимерных сред, включая температуру ударного сжатия.

Библиографический список

1. Morris C.E., Fritz J.N., McQueen R.G. The equation of state of polytetrafluoroethylene to 80 GPa. // J. Chem. Phys. — 1984. — $N \ge 80$ (10).

2. Хищенко К.В. Температура и теплоемкость полиметилметакрилата за фронтом сильных ударных волн // Теплофизика высоких температур. — 1997. — Т. 35, №6.

 Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Киршанов С. И., Ковалев А. Е. и др. Экспериментальные исследования свойств ударно-сжатого карбогала. Уравнения состояния карбогала и оргстекла // ФГВ. — 2004. — Т. 40, № 3.

4. Мержиевский Л.А., Воронин М.С. Моделирование ударно-волнового деформирования полиметилметакрилата // ФГВ. — 2012 — Т. 48, № 2.

5. Shock wave database: server of Institute of Problems of Chemical Physics [Электронный ресурс]. — URL: http://www.ficp.ac.ru/rusbank/.

6. Кормер С. Б. Оптические исследования свойств ударно-сжатых конденсированных диэлектриков // УФН. — 1968. — Т. 94, вып. 4. 7. Rosenberg Z., Parton Y. Direct measurement of temperature in shock-loaded polymethylmethacrylate with very thin copper thermistors // J. Appl. Phys. — 1984. — N_{2} 56 (7).

 Бордзиловский С.А., Караханов С.М., Хищенко К.В. Измерение яркостной температуры эпоксидной смолы при ударном сжатии // ФГВ. — 2013. — Т. 49, № 1.

9. Krupnikov K.K. and Krupnikova V.P. Equations of State and Matter Transformation Parameters Under Shock Compression for Epoxy Resin. Shock Waves @ Marseille III, Springer Verlag. — Berlin, 1995.

10. Бордзиловский С.А., Караханов С.М. Распространение импульса напряжения по ударно-сжатому фторопласту // ФГВ. — 1992. — № 3.

11. Караханов С.М., Бордзиловский С.А. Динамическое поведение политетрафторэтилена в волнах сжатия и разгрузки // ФГВ. — 2000. — Т. 36, № 5.