

УДК 539.63

К. К. Маевский, С. А. Кинеловский

Модель интенсивного динамического нагружения карбидов с различными стехиометрическими составами*

K. K. Maevskij, S. A. Kinelovskij

Dynamic Loading Simulation of Carbides with Various Stoichiometric Compositions

Представлены результаты численных экспериментов по моделированию ударно-волнового нагружения сплошных и пористых карбидов с различными стехиометрическими составами. Модель основана на предположении, что все компоненты смеси, включая газ в порах, при ударно-волновом нагружении находятся в термодинамическом равновесии. Конденсированные фазы описываются уравнением состояния типа Ми-Грюнайзена, коэффициент Грюнайзена зависит в явном виде только от температуры. Модель достоверно описывает поведение карбидов с равными долями компонентов WC, TaC, TiC, NbC и поведение карбида бора B_4C , рассматривая химическое соединение как механическую смесь. Проведено сравнение для карбидов различной пористости данных расчета и полученных экспериментально.

Ключевые слова: ударная адиабата, пористая гетерогенная среда, порошковая смесь, коэффициент Грюнайзена.

DOI 10.14258/izvasu(2014)1.1-17

Исследования поведения пористых смесей порошковых материалов при ударно-волновом нагружении представляют интерес для многих задач современной науки и решения прикладных задач, использующих взрывные технологии. В [1, с. 71; 2, с. 13] рассмотрена модель ударно-волнового нагружения пористых сред и смесей порошков. Используются только уравнения состояния компонентов смеси. Предполагается, что все компоненты смеси, включая газ в порах, при интенсивных динамических нагрузках имеют равные скорости и находятся в термодинамическом равновесии. Для описания поведения конденсированных фаз используются уравнения состояния типа Ми-Грюнайзена. Холодная составляющая давления описывается уравнением типа уравнения Тэта. Уравнение состояния для каждого i -го компонента с текущей и начальной плотностью ρ_i, ρ_{i0} и теплоемкостью c_{vi} имеет вид:

$$P = A_i \left(\left(\rho_i / \rho_{i0} \right)^{n_i} - 1 \right) + \Gamma_i c_{vi} (T - T_0) \rho_i,$$

где $i = 1, 2, \dots$

Numerical simulation results of shock wave loading of solid and porous carbides with various stoichiometric compositions are presented. A model for simulation is based on the assumption that all of the mixture components including gas in pores are in thermodynamic equilibrium under shock wave loading. Behavior of condensed phases is described by the Mie-Grüneisen equation of state with Grüneisen parameter being explicitly dependent of temperature. The model accurately predicts behavior of carbides with equal shares of WC, TiC, TaC, NbC components and behavior of boron carbide B_4C while treating the chemical compound as a mechanical mixture. Comparison between experimental and calculated data for carbides of different porosity is presented.

Key words: shock adiabat, the porous heterogeneous media, powder mixture, the Grüneisen coefficient.

Для газа берется уравнение состояния идеального газа. Выписываются условия динамической совместности на фронте ударной волны: условия сохранения потока массы для каждого компонента смеси и условия сохранения потоков импульса и энергии для смеси в целом. Для смеси с двумя конденсированными компонентами можно получить следующее выражение:

$$P = \frac{Z_1 + Z_2 \frac{\mu_{20}\sigma_1}{\mu_{10}\sigma_2}}{h_1 + \frac{\mu_{20}\sigma_1}{\mu_{10}\sigma_2} h_2 + \frac{(1-\mu_{10}-\mu_{20})\sigma_1}{\mu_{10}\sigma_g} h_3 - \frac{\sigma_1}{\mu_{10}}}$$

где $Z_i = A_i \left[\left[h_i - \frac{n_i + 1}{n_i - 1} \right] \sigma_i^{n_i} + \frac{2n_i \sigma_i}{n_i - 1} - h_i - 1 \right]$, $h_i = \frac{2}{\Gamma_i} + 1$

$$h_3 = \frac{2}{\gamma - 1}, \quad i=1,2, \quad ,$$

$\sigma_1 = \rho_i / \rho_{i0}$; $\sigma_2 = \rho_j / \rho_{j0}$; $\sigma_g = \rho_g / \rho_{g0}$ — степени сжатия компонентов смеси, а ρ_g, ρ_{g0} — текущая и начальная

* Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект 13-03-00663).

плотности газа. Вместе с равенством температур компонентов имеем три уравнения для четырех переменных $P, \sigma, \sigma_p, \sigma_g$, позволяющих построить уравнения состояния смеси.

С учетом существенного роста температуры для пористых материалов при динамических нагрузках [3, с. 556] и при давлениях выше 5 ГПа рассматривается коэффициент Грюнайзена G , зависящий в первом приближении только от температуры, что позволило описать с точностью эксперимента поведение пористых материалов и смесей в широком диапазоне пористостей и давлений. На основании этих результатов было высказано предположение о возможности описания этой моделью поведения сложных материалов, в частности карбидов, рассматривая химическое соединение как смесь. Ранее это предположение уже использовалось для описания поведения карбидов по аналогии со сплавами, для которых применялся метод аддитивного приближения [4, с. 132].

Как отмечалось в [5, с. 58], интерес к исследованию сжимаемости карбидов связан, в частности, с проблемами взрывного компактирования порошков карбидов, т. е. с вопросами получения микрообразцов этих соединений, обладающих свойствами (твердость, хрупкость) исходных крупинки образцов. При описании поведения карбидов аналогично [5, с. 58] за исходные компоненты металлов принимались адиабаты металлов, построенные по модели [1, с. 71], а в качестве легкого компонента бралась адиабата для алмаза по той же модели. Результаты расчетов и экспериментальные данные показаны на рисунке 1 для карбидов вольфрама, ниобия, тантала, титана, а также бора. За исключением карбида тантала, для которого при давлении 500 ГПа расчет дает несколько большее значение сжатия образца, расчеты удовлетворительно описывают данные экспериментов.

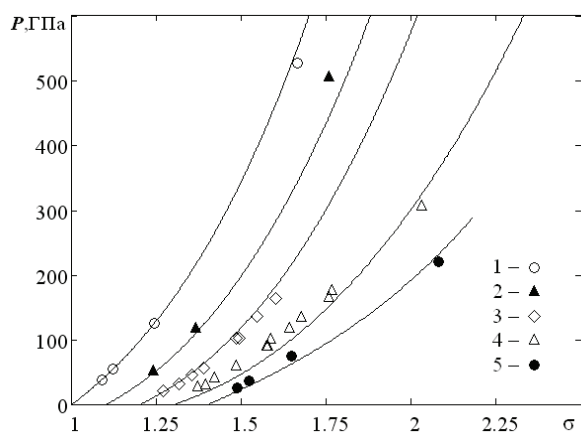


Рис. 1. Расчет и экспериментальные данные:
1 — WC; 2 — TaC [6, с. 2175]; 3 — NbC; 4 — TiC
[5, с. 58]; 5 — B₄C [6, с. 2175]

Объемные доли компонентов, необходимые для модели [1, с. 71], для карбидов определялись исходя

из стехиометрического соотношения элементов. Видно, что расчет соответствует экспериментальным данным и ранее произведенным расчетам из [4, с. 140].

Аналогичные расчеты были проведены для карбидов различной пористости. Соотношение объемных долей конденсированных компонентов уменьшалось пропорционально пористости образца (отношение плотности монолитного вещества к исходной плотности). Для карбида вольфрама (пористость $m = 1.201$), карбида тантала $m = 1.125$ и карбида ниобия $m = 1.07$ получено описание поведения пористых материалов в пределах точности эксперимента (рис. 2). Предположение о возможности определять для расчета объемные доли компонентов исходя из стехиометрического соотношения позволило достоверно описать поведение карбидов как с равными долями компонентов, так и поведение карбида бора B₄C. Данный материал обладает высоким значением твердости [9, с. 188], уступая по этому показателю только алмазу, что вызывает к нему повышенный интерес. Для карбида бора объемные доли определялись в соотношении 4:1 соответственно химическому составу.

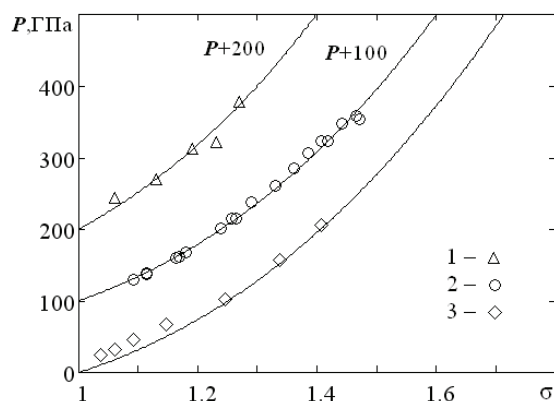


Рис. 2. Расчет и экспериментальные данные:
1 — WC ($m=1.201$) [7, с. 417]; 2 — TaC ($m=1.125$)
[8, с. 351]; 3 — Nb ($m = 1.07$) [5, с. 58]

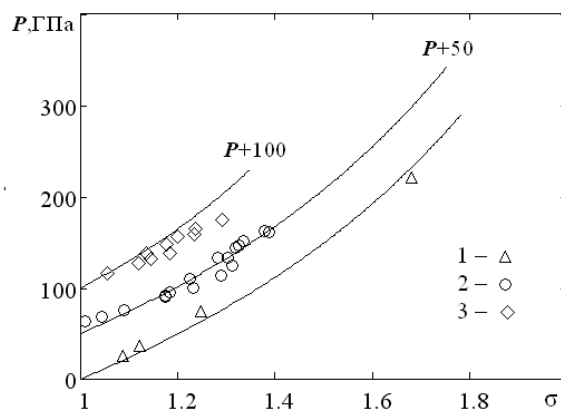


Рис. 3. Расчет и экспериментальные данные B₄C:
1 — $m = 1$ [6, с. 2175]; 2 — $m = 1.04$, 3 — $m = 1.29$ [8, с. 245]

Указанное предположение позволило описать поведение карбида бора при интенсивных динамических нагрузках как для сплошных, так и для пористых образцов. Расчеты и соответствующие экспериментальные данные из [8, с. 245] для образцов карбида бора с пористостью $m = 1.04$, $m = 1.29$ и $m = 1$ (сплошной карбид) приведены на рисунке 3.

Как видно, при пористости 1.29, где доля воздуха почти 30%, расчет занижает значение сжатия образцов; при пористости 1.04 соответствие расчета и экспериментальных данных выглядит более убедительно. С учетом того, что с ростом пористости точность определения экспериментальных данных пада-

ет, можно считать, что, по крайней мере, в диапазоне до 50 ГПа, который интересен с точки зрения исследований, связанных с кумулятивным синтезом, получено удовлетворительное соответствие.

Таким образом, показано, что предложенная в [1, с. 71] модель позволяет описывать динамическое нагружение карбидов различной пористости, рассматривая их как смесь компонентов, соответствующих химическому составу карбидов. Получено достоверное описание как для карбидов с равными долями 1:1 в стехиометрическом соотношении, так и для карбида бора, имеющего, соответственно, соотношение 1:4.

Библиографический список

1. Кинеловский С. А., Маевский К. К. Расчет ударной адиабаты порошковых смесей с учетом зависимости коэффициента Грюнайзена от температуры // Вестник НГУ. Сер.: Физика. — 2009. — Т. 4, № 4.
2. Кинеловский С. А., Маевский К. К. Модель поведения смеси с различными свойствами компонентов при высоких динамических нагрузках // ПМТФ. — 2013. — Т. 54, № 4.
3. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М., 1966.
4. Трунин Р. Ф. Исследования экстремальных состояний конденсированных веществ методом ударных волн. — Саров, 2006.
5. Баканова А. А., Бугаева В. А., Дудолодов И. П., Трунин Р. Ф. Ударная сжимаемость нитридов и карбидов металлов // Известия АН СССР. Сер.: Физика Земли. — 1995. — № 6.
6. Павловский М. Н. Ударная сжимаемость шести высокотвердых веществ // ФТТ. — 1970. — Т. 12, вып. 7.
7. Трунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Симаков Г. В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. — Саров, 2006.
8. Marsh S. P. (Ed.). LASL Shock Hugoniot Data. — Univ. California Press, Berkeley, 1980.
9. Косолапова Т. Я. Карбиды. — М., 1968.