

УДК 536.7

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ТИТАНА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

© 2024 г. К. В. Хищенко^{1, 2, 3, *}¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия³Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия

*E-mail: konst@ihed.ras.ru

Поступила в редакцию 15.12.2022 г.

После доработки 12.01.2024 г.

Принята к публикации 14.02.2024 г.

Предложено уравнение состояния для титана в форме аналитической функции давления от удельного объема и удельной внутренней энергии. Сопоставление результатов расчета ударных адиабат для образцов различной начальной плотности с имеющимися данными ударно-волновых экспериментов свидетельствует об адекватности описания термодинамических свойств объемно-центрированной кубической кристаллической фазы и расплава этого металла в области высоких давлений. Разработанное уравнение состояния может быть использовано при моделировании различных адиабатических процессов в веществе при интенсивных импульсных воздействиях.

DOI: 10.31857/S0040364424020039

ВВЕДЕНИЕ

Развитие средств интенсивного импульсного воздействия на материалы оказывает стимулирующее влияние на исследования при высоких плотностях энергии [1–3]. К примеру, с помощью газовых пушек [4, 5], взрывомагнитных генераторов [6–8], импульсных источников лазерного излучения [9–11], генераторов импульсов тока [12–14] создаются состояния вещества при высоких давлениях и удельных внутренних энергиях. Для анализа и численного моделирования динамики физических процессов при таких воздействиях необходимо знать уравнение состояния [15–21] используемого материала во всем реализуемом диапазоне термодинамических параметров.

Эксперименты с ударными волнами служат источником информации о термодинамических свойствах исследуемых веществ в форме взаимосвязи давления P , удельного объема V и удельной внутренней энергии E [1, 3]. На основе данных таких экспериментов может быть построено, в частности, уравнение состояния $E = E(V, P)$ или $P = P(V, E)$ [18, 22, 23], которое позволяет сделать систему уравнений движения вещества замкнутой [10]. Следует отметить, что в этом случае температура может быть определена с использованием соотношений термодинамики и допол-

нительной информации, например, по тепловому расширению вещества при атмосферном давлении [24] или температуре вещества за фронтом ударной волны [25].

Титан и его сплавы широко применяются в качестве конструкционных материалов, несущих большие силовые и тепловые нагрузки [26]. Известны различные полуэмпирические уравнения состояния этого металла в области высоких давлений [21, 23, 27–34].

В настоящей работе для титана предложено новое уравнение состояния, отличительной особенностью которого является лежащее в его основе простое выражение [35], задающее аналитическую функцию $P(V, E)$ и применявшееся ранее для других металлов [36–39]. Для иллюстрации качества предложенного уравнения состояния проведено сопоставление расчетных ударных адиабат образцов различной начальной плотности с имеющимися для титана данными ударно-волновых экспериментов.

МОДЕЛЬ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

В выбранной модели уравнения состояния [35] давление выражается через удельный объем и удельную внутреннюю энергию вещества в виде суммы холодной (при нулевой температуре, $T = 0$) и тепловой частей:

$$P(V, E) = P_c(V) + \frac{\Gamma(V, E)}{V} [E - E_c(V)], \quad (1)$$

$$\Gamma(V, E) = \gamma_i + \frac{\gamma_c(V) - \gamma_i}{1 + \sigma^{-2/3} [E - E_c(V)] / E_a}, \quad (2)$$

где E_c , P_c и γ_c – внутренняя энергия, давление $P = -(\partial E / \partial V)_S$ и коэффициент Грюнрайзен на $\gamma = V(\partial P / \partial E)_V$ на холодной кривой (изотерме $T = 0$); $\sigma = V_0 / V$ – степень сжатия, V_0 – удельный объем рассматриваемого материала при нормальных условиях; γ_i и E_a – константы.

Внутренняя энергия и давление на холодной кривой задаются в виде [40, 41]

$$E_c(V) = \frac{V_{0c} B_{0c}}{m - n} \left(\frac{\zeta^m}{m} - \frac{\zeta^n}{n} \right) + E_s, \quad (3)$$

$$P_c(V) = B_{0c} \frac{\zeta^m - \zeta^n}{m - n}, \quad (4)$$

где $\zeta = V_{0c} / V$; V_{0c} и B_{0c} – удельный объем и модуль объемного сжатия при $P = 0$ и $T = 0$;

$$E_s = \frac{V_{0c} B_{0c}}{mn}, \quad (5)$$

m и n – константы.

Коэффициент Грюнрайзен на холодной кривой задается согласно выражению [36–39, 42]

$$\gamma_c(V) = 2/3 + (\gamma_{0c} - 2/3) \frac{\delta_n + \ln^2 \sigma_m}{\delta_n + \ln^2 (\sigma / \sigma_m)}, \quad (6)$$

в котором δ_n и σ_m – константы,

$$\gamma_{0c} = \gamma_i + (\gamma_0 - \gamma_i) \left[1 + \frac{E_0 - E_c(V_0)}{E_a} \right]^2, \quad (7)$$

E_0 и γ_0 – удельная внутренняя энергия и коэффициент Грюнрайзен при нормальных условиях, $P(V_0, E_0) = P_0 = 0.1$ МПа.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ ТИТАНА

На рис. 1–3 представлены результаты расчета термодинамических характеристик титана при высоких давлениях на основе представленной выше модели в сравнении с некоторыми имеющимися экспериментальными данными.

Титан при нормальных условиях имеет гексагональную плотноупакованную структуру (α -фаза), которая при изотермическом увеличении давления превращается в другую гексагональную структуру (ω -фаза) [43–45]. При повышении температуры образуется объемно-центрированная кубическая структура (β -фаза) титана [43, 45, 46] (при 0.1 МПа переход α – β происходит при 1155 К [46]), которая при атмосферном давлении плавится при 1941 К [43]. В ходе сжатия титана при постоянной комнатной температуре образование β -фазы отмечается при 243 ГПа [47].

Ударная сжимаемость титана изучена с использованием традиционных взрывных систем до давлений 120 ГПа [48–55]. С помощью легкогазовой пушки измерения параметров ударных волн в образцах этого металла проведены до давлений около 270 ГПа [56]. Применение специальных взрывных систем позволило для титана расширить изученный диапазон до 1.3 ТПа [50, 53, 57].

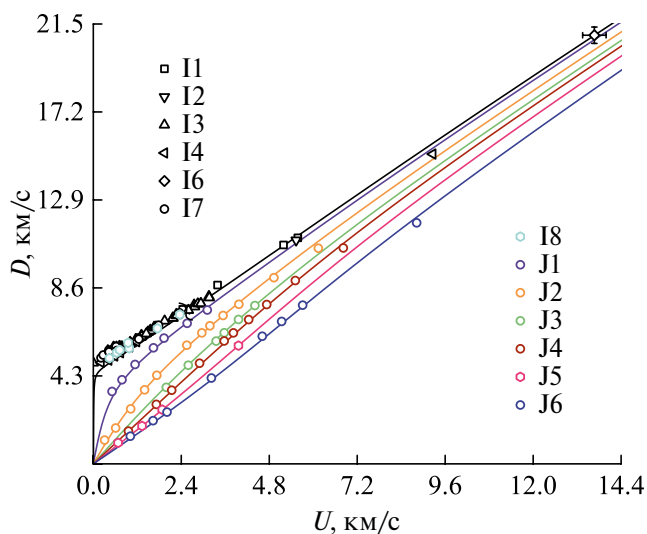


Рис. 1. Волновая D и массовая U скорости на ударных адиабатах образцов титана различной начальной плотности ρ_{00} : линии – результаты расчета по (1)–(7) для $\rho_{00} = 4.5, 4.03, 3.03, 2.25, 1.8, 1.24$ и 0.8 г/см³ (сверху вниз); маркеры – данные экспериментов (I1 – [50]; I2 – [56]; I3 – [48, 49, 51, 52]; I4 – [53]; I6 – [57]; I7, J1–J4, J6 – [54]; I8, J5 – [55]); волнистая линия – примерное положение нижней границы области β -фазы при ударном нагружении.

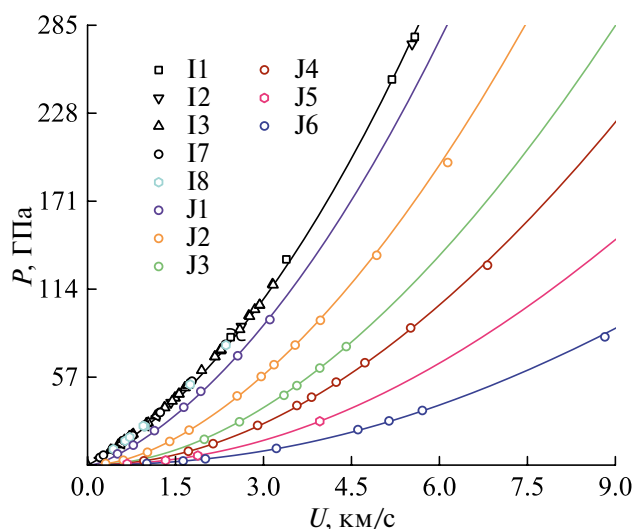


Рис. 2. Давление P и массовая скорость U на ударных адиабатах образцов титана различной начальной плотности; обозначения аналогичны рис. 1.

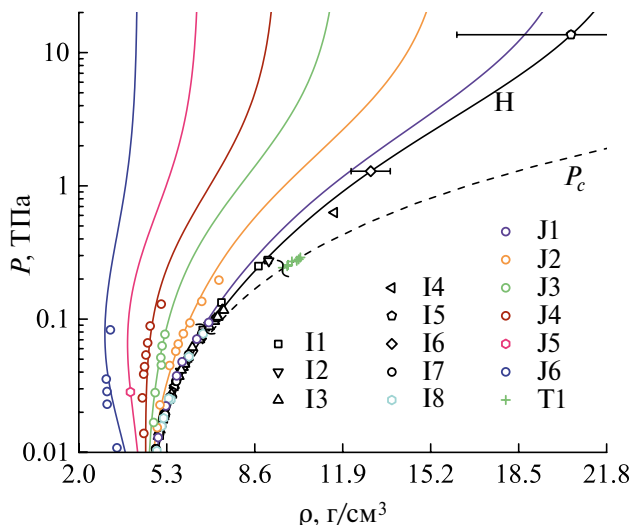


Рис. 3. Давление P в зависимости от плотности ρ при изотермическом и ударном сжатии титана: сплошные и штриховая линии — результаты расчета ударных адиабат (Н) для $\rho_{00} = 4.5, 4.03, 3.03, 2.25, 1.8, 1.24$ и 0.8 г/см³ (справа налево) и холодной кривой P_c по представленному уравнению состояния; маркеры — данные экспериментов по сжатию образцов при постоянной комнатной температуре (Т1 — [47]) и в ударных волнах (I1 — [50]; I2 — [56]; I3 — [48, 49, 51, 52]; I4 — [53]; I5 — [58, 59]; I6 — [57]; I7, J1–J4, J6 — [54]; I8, J5 — [55]); волнистые линии — примерное положение нижней границы области β -фазы при ударном и изотермическом сжатии.

В сильной ударной волне от подземного ядерного взрыва в этом металле зарегистрировано давление около 14 ТПа [58, 59].

Построенное уравнение состояния для титана обобщает данные экспериментов при высоких давлениях в области объемно-центрированной кубической твердой фазы и расплава. Расчет ударных адиабат проведен по уравнениям гидродинамики [1, 39] для образцов различной начальной плотности. Рис. 1–3 иллюстрируют хорошее согласие расчетных результатов с имеющимися экспериментальными данными (при ударном сжатии исходно сплошных образцов от 85 ГПа, при изотермическом сжатии при комнатной температуре от 243 ГПа) до максимального достигнутого в эксперименте давления.

Параметры уравнения состояния титана по модели (1)–(7) выбраны согласно требованию оптимального описания имеющихся экспериментальных данных в области высоких давлений следующими: $V_0 = 0.22173$ см³/г, $V_{0c} = 0.22071$ см³/г, $B_{0c} = 91.7879$ ГПа, $m = 0.45$, $n = 0.82$, $\sigma_m = 0.8$, $\delta_n = 1.16$, $\gamma_{0c} = 1.37$, $\gamma_i = 0.47$, $E_a = 52$ кДж/г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты, полученные по представленному уравнению состояния титана, хорошо согласуются с экспериментальными данными, имеющими-

ся для этого металла в области объемно-центрированной кубической твердой фазы и расплава. Это уравнение состояния может быть использовано для расчета термодинамических характеристик титана при анализе физических явлений при высоких плотностях энергии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-19-00713, <https://rscf.ru/project/19-19-00713/>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
2. Physics of High Energy Density / Eds. Caldirola P., Koenpfel H. N.Y.: Acad. Press, 1971.
3. Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л., Фортон В.Е. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. Черноголовка: ОИХФ АН СССР, 1988.
4. Ростилев Т.А., Зиборов В.С. Экспериментальное исследование ударных волн в режиме стационарного распространения в полимеризованной эпоксидной смоле // ТВТ. 2022. Т. 60. № 6. С. 922.
5. Rodionov E.S., Pogorelko V.V., Lupanov V.G., Mayer P.N., Mayer A.E. Modified Taylor Impact Tests with Profiled Copper Cylinders: Experiment and Optimization of Dislocation Plasticity Model // Materials. 2023. V. 16. № 16. P. 5602.
6. Гриневич Б.Е., Демидов В.А., Ивановский А.В., Селемир В.Д. Взрывоманитные генераторы энергии и их применение в научных экспериментах // УФН. 2011. Т. 181. № 4. С. 422.
7. Минцев В.Б. Динамические методы в физике неидеальной плазмы. Начало // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 885.
8. Козлов А.В., Маистаков А.В., Шурупов А.В., Гусев А.Н., Завалова В.Е., Шурупов М.А., Шурупова Н.П., Житлухин А.М., Бахтин В.П. Нелинейные плазменные нагрузки с питанием от взрывоманитных генераторов в режиме растущей мощности // ТВТ. 2022. Т. 60. № 3. С. 331.
9. Хохлов В.А., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Ашитков С.И., Ситников Д.С., Хищенко К.В., Петров Ю.В., Манохин С.С., Неласов И.В., Шенелев В.В., Колобов Ю.Р. Плавнение титана ударной волной, вызванной мощным фемтосекундным лазерным импульсом // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 115. № 9. С. 576.
10. Семенов А.Ю., Абросимов С.А., Стучебрюхов И.А., Хищенко К.В. Изучение динамики волновых процессов сжатия и расширения в палладии при пикосекундном лазерном воздействии // ТВТ. 2023. Т. 61. № 4. С. 542.
11. Ашитков С.И., Струлёва Е.В., Комаров П.С., Евлашин С.А. Ударное сжатие молибдена при воздействии ультракороткими лазерными импульсами // ТВТ. 2023. Т. 61. № 5. С. 790.
12. Barengolts S.A., Uimanov I.V., Oreshkin V.I., Khishchenko K.V., Oreshkin E.V. Effect of the Temperature of an

- Electrode Microprotrusion on the Microcrater Formation on the Electrode Surface upon Pulsed and Radiofrequency Vacuum Breakdowns // *Vacuum*. 2022. V. 204. P. 111364.
13. Онуфриев С.В., Савватимский А.И. Электросопротивление жидкого углерода (до 9000 К) и жидкого гадолиния (до 6000 К) при повышенном давлении и высоких температурах // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 5. С. 685.
 14. Kondratyev A.M., Rakhel A.D. Measurements of Shock-Propagation Velocities in Liquid Lead across the Metal-Nonmetal Transition Range // *Phys. Rev. B*. 2023. V. 107. № 19. P. 195134.
 15. Маевский К.К. Численное моделирование термодинамических параметров германия // *ТВТ*. 2022. Т. 60. № 6. С. 837.
 16. Николаев Д.Н., Ломоносов И.В. Уравнение состояния оксида железа при давлении ≤ 1 ТПа // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 2. С. 318.
 17. Бобров В.Б. О замкнутом интерполяционном уравнении состояния для простой жидкости // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 3. С. 349.
 18. Ломоносов И.В. Уравнения состояния сапфира, кремнезема, периклаза и рутила // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 3. С. 473.
 19. Шумихин А.С. Проблема уравнения состояния тугоплавких металлов в околокритической области // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 5. С. 655.
 20. Бельхеева Р.К. О влиянии пористости и давления на параметры уравнения состояния пористых веществ // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 5. С. 693.
 21. Медведев А.Б. Определение плотности ядра Земли на основе уравнений состояния железа и титана при высоких давлениях и температурах // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 5. С. 854.
 22. Бушман А.В., Фортков В.Е. Модели уравнения состояния вещества // *УФН*. 1983. Т. 140. № 2. С. 177.
 23. Cox G. An Equation of State for Ti-6Al-4V // *AIP Conf. Proc.* 2012. V. 1426. P. 1559.
 24. Фортков В.Е. Уравнения состояния конденсированных сред // *ПМТФ*. 1972. № 6. С. 156.
 25. Николаев Д.Н., Пяллинг А.А., Хищенко К.В., Терновой В.Я., Фортков В.Е. Термодинамические свойства бромоводорода при высоких давлениях // *Хим. физика*. 2000. Т. 19. № 10. С. 98.
 26. Chekhovskoi V.Ya., Fokin L.R., Peletskii V.E., Petukhov V.A., Shur B.A. Handbook of Titanium-Based Materials: Thermophysical Properties, Data and Studies. N.Y.: Begell House, 2007.
 27. Greeff C.W., Trinkle D.R., Albers R.C. Shock-Induced α - ω Transition in Titanium // *J. Appl. Phys.* 2001. V. 90. № 5. P. 2221.
 28. Kerley G.I. Equations of State for Titanium and Ti6Al4V Alloy. Sandia Report SAND2003-3785. Albuquerque, NM: Sandia National Lab., 2003.
 29. Pecker S., Eliezer S., Fisher D., Henis Z., Zinamon Z. A Multiphase Equation of State of Three Solid Phases, Liquid, and Gas for Titanium // *J. Appl. Phys.* 2005. V. 98. № 3. P. 043516.
 30. Povarnitsyn M.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R. Simulation of Shock-Induced Fragmentation and Vaporization in Metals // *Int. J. Impact Eng.* 2008. V. 35. № 12. P. 1723.
 31. Кинеловский С.А., Маевский К.К. Простая модель расчета ударных адиабат порошковых смесей // *ФГВ*. 2011. Т. 47. № 6. С. 101.
 32. Cox G. An Equation of State for Titanium // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2011. V. 286. P. 012043.
 33. Молодец А.М., Голышев А.А. Электропроводность и полиморфный переход титана в мегабарной области давлений ударного сжатия // *ФТТ*. 2014. Т. 56. № 12. С. 2435.
 34. Khishchenko K.V. Equation of State for Titanium at High Energy Densities // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2016. V. 774. P. 012001.
 35. Хищенко К.В., Жерноклетов М.В., Ломоносов И.В., Сутолов Ю.Н. Динамическая сжимаемость, адиабаты разгрузки и уравнение состояния стилибена при высоких плотностях энергии // *ЖТФ*. 2005. Т. 75. № 2. С. 57.
 36. Khishchenko K.V. Equation of State of Hafnium at High Pressures in Shock Waves // *Phys. Wave Phenom.* 2023. V. 31. № 2. P. 123.
 37. Khishchenko K.V. Equation of State for Tantalum at High Pressures in Waves of Shock Compression and Isentropic Expansion // *Phys. Wave Phenom.* 2023. V. 31. № 4. P. 273.
 38. Хищенко К.В. Уравнение состояния алюминия при высоких давлениях // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 3. С. 477.
 39. Хищенко К.В. Уравнение состояния циркония при высоких давлениях // *ТВТ*. 2023. Т. 61. № 5. С. 783.
 40. Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортков В.Е., Хищенко К.В. Уравнения состояния полимерных материалов при высоких давлениях // *Хим. физика*. 1994. Т. 13. № 1. С. 64.
 41. Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортков В.Е., Хищенко К.В. Уравнения состояния насыщенных органических соединений при высоких давлениях // *Хим. физика*. 1994. Т. 13. № 5. С. 97.
 42. Khishchenko K.V. Equation of State for Bismuth at High Energy Densities // *Energies*. 2022. V. 15. № 19. P. 7067.
 43. Тонков Е.Ю. Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. М.: Наука, 1979.
 44. Sikka S.K., Vohra Y.K., Chidambaram R. Omega Phase in Materials // *Prog. Mater. Sci.* 1982. V. 27. P. 245.
 45. Dewaele A., Stutzmann V., Bouchet J., Bottin F., Occelli F., Mezouar M. High Pressure–Temperature Phase Diagram and Equation of State of Titanium // *Phys. Rev. B*. 2015. V. 91. № 13. P. 134108.
 46. McQuillan A.D. Some Observations on the α - β Transformation in Titanium // *J. Inst. Metals*. 1950. V. 18. P. 249.
 47. Akahama Y., Kawaguchi S., Hirao N., Ohishi Y. Observation of High-Pressure BCC Phase of Titanium at 243 GPa // *J. Appl. Phys.* 2020. V. 128. № 3. P. 035901.
 48. Walsh J.M., Rice M.H., McQueen R.G., Yarger F.L. Shock-Wave Compressions of Twenty-Seven Metals. Equations of State of Metals // *Phys. Rev.* 1957. V. 108. № 3. P. 196.
 49. McQueen R.G., Marsh S.P. Equation of State for Nineteen Metallic Elements from Shock-Wave Measurements to Two Megabars // *J. Appl. Phys.* 1960. V. 31. № 7. P. 1253.
 50. Круников К.К., Баканова А.А., Бражник М.И., Трунин Р.Ф. Исследование ударной сжимаемости

- титана, молибдена, тантала и железа // ДАН СС-СР. 1963. Т. 148. № 6. С. 1302.
51. *McQueen R.G., Marsh S.P., Taylor J.W., Fritz J.N., Carter W.J.* The Equation of State of Solids from Shock Wave Studies // High-Velocity Impact Phenomena / Ed. Kinslow R. N.Y.: Acad. Press, 1970. P. 293.
 52. LASL Shock Hugoniot Data / Ed. Marsh S.P. Berkeley, CA: Univ. of California Press, 1980.
 53. *Альтишлер Л.В., Баканова А.А., Дудолодов И.П., Дынин Е.А., Трунин Р.Ф., Чекин Б.С.* Ударные адиабаты металлов. Новые данные, статистический анализ и общие закономерности // ПМТФ. 1981. № 2. С. 3.
 54. *Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Медведев А.Б.* Сжатие титана в ударных волнах // ТВТ. 1999. Т. 37. № 6. С. 881.
 55. *Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В.* Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров: РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2006.
 56. *Isbell W.H., Shipman F.H., Jones A.H.* Hugoniot Equation of State Measurements for Eleven Materials to Five Megabars. Material Science Laboratory Report MSL-68-13. Warren, MI: General Motors Tech. Center, 1968.
 57. *Трунин Р.Ф., Панов Н.В., Медведев А.Б.* Сжимаемость железа, алюминия, молибдена, титана и тантала при давлениях ударных волн в 1–2.5 ТПа // Письма в ЖЭТФ. 1995. Т. 62. № 7. С. 572.
 58. *Трунин Р.Ф., Ильяева Л.А., Подурец М.А., Попов Л.В., Печенкин Б.В., Прохоров Л.В., Севастьянов А.Г., Хрусталева В.В.* Измерение ударной сжимаемости железа, меди, свинца и титана при давлениях в 20 ТПа // ТВТ. 1994. Т. 32. № 5. С. 692.
 59. *Трунин Р.Ф.* Ударная сжимаемость конденсированных веществ в мощных ударных волнах подземных ядерных взрывов // УФН. 1994. Т. 164. № 11. С. 1215.