

К ВОПРОСУ ОБ УРАВНЕНИЯХ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ МЕТАЛЛОВ В МОДЕЛЯХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВЗРЫВА ПРОВОДНИКОВ

*Институт импульсных процессов и технологий НАН Украины,
пр. Октябрьский, 43-А, г. Николаев, 54018, Украина, defr@iipt.com.ua*

Введение. Эффективное применение электрического взрыва проводников в реализации различных технологических процессов, технике эксперимента, возможность использования этого явления в качестве перспективного метода изучения критических состояний металлов [1], определения температурной зависимости кинетических коэффициентов [2] в широкой области температур и давлений предполагает наличие достаточно надежной модели, описывающей процесс электрического взрыва. Экспериментальные и теоретические исследования разрушения проводников при протекании по ним токов показали, что в зависимости от плотности тока можно выделить для описания явления две основные модели: МГД-модель и модель, где преобладающими являются тепловые процессы [3]. В обеих моделях существенным является определение свойства вещества, то есть его термодинамических функций по мере того, как металл проводника претерпевает различные фазовые превращения от твердого состояния до плазменного. В этом смысле определение роли физических факторов, приводящих в зависимости от скорости нагружения к достоверному описанию той или иной моделью явления электровзрыва, в значительной мере зависит от достижений в области построения и использования реальных уравнений состояния [4–8]. Наиболее совершенные из современных широкодиапазонных уравнений состояния металлов – В.Е. Фортова с соавторами [7], И.Л. Иосилевского [8] и др. имеют интерполяционную структуру и, в силу этого, в некоторых переходных областях обладают недостаточной точностью. Поэтому нахождение более точной формулы для вычисления термодинамических параметров в переходных областях – весьма актуальная задача. Ранее [9] нами было представлено термическое уравнение состояния металлов для динамических задач моделирования разрушения проводников при электровзрыве. Его вид и коэффициенты были получены при использовании экспериментальных результатов ряда авторов, то есть по своей сути это уравнение полуэмпирическое. Цель настоящей работы – получение аналитического широкодиапазонного уравнения состояния для металлов из самых общих физических представлений, дающего хорошее согласие с экспериментальными результатами в некоторых диапазонах параметров состояния вещества.

Некоторые известные уравнения. Основными "неуспехами" в развитии теоретических моделей электровзрыва, по-видимому, следует считать ограниченное число металлов, для которых удалось построить уравнение состояния, огромное число подгоночных параметров, присущих каждой модели; значительное число упрощающих предположений, не носящих общего характера; отсутствие предельных переходов от твердого тела к плазменному состоянию. При таком положении вещей, несмотря на ряд обзоров и появившиеся в последнее время сообщения о достижениях и проблемах теории уравнений состояний [4], нам представляется необходимым провести некоторый анализ физических моделей вещества, ставших уже классическими, с тем, чтобы перейти в дальнейшем к более обоснованному использованию формы описания состояния вещества в модели электрического взрыва.

Основой для анализа и построения полуэмпирического уравнения состояния в нашем случае служат обычные условия Ван-дер-Ваальса для определения поведения критической изотермы, дополненные требования, предъявляемые к широкодиапазонным (глобальным) уравнениям состояния [10]. Поскольку в процессе электрического разрушения проводников происходит несколько фазовых последовательных превращений, то используемое для описания таких процессов УРС должно адекватно описывать твердое, жидкое и газообразное (плазменное) состояние, а в отдельных случаях – и двухфазное.

В ранних работах [11], да и в настоящее время [12], для описания электровзрыва использовалось уравнение Ван-дер-Ваальса, оно, согласно [13], в координатах P , ρ , T может быть представлено в виде

$$p = \left(1 - \frac{1}{3}x + \frac{1}{9}x^2 + \dots + \frac{1}{3^n}x^n \right) \frac{x\tau}{Z_c} - \rho x^2. \quad (1)$$

Здесь $p = P/P_c$; $x = \rho/\rho_c$; $\tau = T/T_c$; $Z_c = \frac{\mu}{R} \cdot \frac{P_c}{\rho_c T_c}$ – фактор сжимаемости в критической точке (критический фактор сжимаемости).

Нетрудно показать, что одно из самых простейших условий [10] $\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{\tau=\tau_0} = c^2$, где приведенная скорость звука $c_r = \sqrt{\partial p_x / \partial x}$, при нормальных условиях в данном случае не выполняется ($c^2 = -6x_0$). В нормальных условиях приведенная скорость звука для металлов – порядка 10.

Таким образом, распространять уравнение состояния Ван-дер-Ваальса либо его модификации на конденсированные фазы металлов, по-видимому, следует очень осторожно.

Здесь следует также заметить, что критический фактор сжимаемости для металлов составляет, согласно [14], 0,284. В УРС Ван-дер-Ваальса и в других его модификациях, кроме уравнения Дитеричи, $z = 0,375$.

Желание использовать наиболее простую аналитическую модель, в которой удалось бы провести вычисление практически всех термодинамических величин, приводит в ряде случаев к использованию малых целочисленных степеней для описания упругой составляющей давления. Эта составляющая давления в терминах относительных плотностей может быть записана для взаимодействующих частиц [15] как

$$p_\tau = -\frac{\tau x}{z}; \quad p_x = a \left(x^2 + \frac{b}{a} x^3 \right). \quad (2)$$

Здесь $a = -3$; $b = 1$. При таком соотношении констант приведенная скорость звука равна 4, что значительно ближе к действительному, однако меньше экспериментальных значений скорости звука для металлов.

В обзоре [10] как наиболее широко распространенное приводится уравнение типа

$$p_x = a \left(x^{\frac{m}{3}+1} - b x^{\frac{n}{3}+1} \right). \quad (3)$$

Согласно этому же обзору, Ми и Бор использовали уравнение при $n = 3$, а целый ряд работ был направлен на уточнение m и n .

Если использовать форму записи тепловой составляющей давления как идеально-газовую составляющую, то, определяя константы по Ван-дер-Ваальсу, легко показать, что при $n - m \leq 1$ скорость звука всегда будет оставаться меньше действительной. Кроме того, при такой форме используемого уравнения она оказывается не зависящей от температуры.

В последнее время для описания электровзрыва все чаще используется интерполяционное уравнение состояния металлов Колгатина и Хачатурьянца [6, 16, 17]. Оно после некоторых преобразований и оценок может быть приведено к виду

$$p_\tau = \frac{4}{9} \left(\frac{1 + 3\gamma x^k / l\tau}{1 + x^k / l\tau} \right); \quad p_x = a x^{\frac{m}{3}+1} - b x^{\frac{n}{3}+1}. \quad (4)$$

Здесь γ, a, b, l, k суть константы, определяемые свойствами металлов.

Учитывая вышесказанное, можно предположить, что использование этого уравнения для металлов в конденсированном состоянии возможно лишь с определенными оговорками, т.е. в основном для газоплазменной фазы. Так как для большинства металлов степень $m = (5 \div 6)$, то в лучшем случае мы имеем дело с кубическим уравнением, а разница между степенями $m/3+1$ и $n/3+1$ незначительно отличается от единицы. В этом случае, как уже было сказано выше, скорость звука будет значительно ниже полученной экспериментальным путем. Легко также видеть, что с увеличением температуры вплоть до критической скорость звука будет монотонно расти.

Аналогичные уравнения в виде полинома третьей степени использовались в работах [18, 19]. В [19] уравнение приобретает уже вид, где все коэффициенты зависят от температуры:

$$p(x, \tau) = a(\tau)x + b(\tau)x^2 + c(\tau)x^3. \quad (5)$$

Наконец, в ряде работ, посвященных методу эффективного потенциала ячеечной модели конденсированного вещества, Кессельман с коллегами [20–22] предлагают для металлов в жидком состоянии уравнение, где упругая составляющая давления уже представлена функцией температуры в явном виде:

$$p_x = -A(T)\rho^q + B(T)\rho^f. \quad (6)$$

Здесь $q = 2$, $f = 4$ и определяются из условия оптимального описания опытных термических данных, а f , имеющая более высокую степень по плотности, становится ближе к уравнению Тэйта, где степень по плотности для металлов лежит в пределах от 3,2 до 6,3 [23]. При этом q и f по работам [20–22] обязательно целочисленные.

Покажем, что можно получить несколько иное, хотя и довольно близкое уравнение, где степень по плотности не обязательно является целочисленной. Тем более что проводимый анализ [10] показал, что в наиболее общей форме упругая составляющая давления, как правило, может быть представлена рядом

$$p_x \approx \sum_{i=1}^N a_i x^{i-1/3}.$$

Поэтому ниже при учете основных членов взаимодействия будет проведено последовательное рассмотрение главных членов давления, определяющих вид уравнения состояния для металлов.

Модель уравнения состояния. Для кристаллической решетки металла энергия кулоновского взаимодействия и какого-либо положительного иона со всеми остальными окружающими его зарядами может быть выражена, в зависимости от расстояния d между соседними положительными ионами, формулой того же вида, что и в случае ионной решетки, в которой ионы противоположного знака расположены на расстоянии $d/2$ друг от друга:

$$u = - @e^2/d, \quad (7)$$

где @ – константа Маделунга; e – заряд электрона.

Если фактическое, близкое к равномерному, распределение электронов между положительными ионами металла заменить сосредоточенным распределением, соответствующим концентрации электронов в междузлиях положительных ионов, то для коэффициента @ можно получить значение 3,4.

Электрическая энергия в металлической решетке характеризует силы межчастичного сцепления, обусловленные коллективизацией электронов. Электрические силы сцепления должны при некотором значении $d_0 = d$ уравновешиваться силами отталкивания совершенно иного происхождения. Нетрудно убедиться, что такими силами являются силы инерции, возникающие при движении коллективизированных электронов, точнее, при изменении направления этого движения в случае отражения электронов от поверхности металла. Иными словами, роль сил отталкивания в металлическом теле играет давление, создаваемое коллективизированными электронами, совершенно подобно тому, как это имеет место в обычных газах.

Давление газа определяется через его объем V , число частиц N и среднюю кинетическую энергию одной из них ($mv^2/2 = \varepsilon$) известной формулой кинетической теории газов:

$$PV = \frac{1}{3} Nmv^2 = \frac{2}{3} N\varepsilon.$$

Полагая здесь $\varepsilon = \frac{3}{2}kT$, мы приходим к формуле Клапейрона $PV = NkT$, представляющей собой уравнение состояния обычных газов.

В области обычных температур металла, как указывалось выше, давление зависит только от объема, т.е. не является функцией температуры:

$$PV = (2/3)E, \quad (8)$$

где E – энергия коллективизированных электронов. С другой стороны, средняя энергия электронного газа металла определяется исключительно кинетической энергией коллективизированных электронов, не является тепловой по своему характеру и поэтому от температуры не зависит, по крайней мере, до величин, составляющих единицы электрон-вольт, то есть до нескольких десятков тысяч градусов. На основании этого для рассматриваемого диапазона температур можно с достаточно высокой степенью достоверности предположить, что внешняя работа, производимая электронами при увеличении объема металла на dV , совершается за счет их кинетической энергии: $PdV = -dE = \frac{2}{3}E \frac{dV}{V}$, откуда с использованием (8) имеем: $\ln(V^2E^3) = \text{const}$, то есть

$$E = \text{const}/V^{2/3}. \quad (9)$$

Это соотношение представляет собой не что иное, как закон адиабатического сжатия (или расширения) газов. В то время, как в случае обычных газов адиабатическое сжатие сопровождается нагревом, а расширение охлаждением, температура газа коллективизированных электронов при изменении объема металла остается неизменной. Так как число электронов при этом также остается неизменным, то средняя кинетическая энергия ε отдельных электронов должна меняться с изменением объема по тому же закону (9), как и E . В соответствии с тем, что $V^{1/3}$ пропорционален расстоянию d между соседними ионами, (9) переписывается в виде

$$\varepsilon = \chi/d^2. \quad (10)$$

С другой стороны, де-бройлевская длина волны λ связана со скоростью движения электрона $mv\lambda = 2\pi\hbar$ и должна приблизительно совпадать с $2d$ - длиной орбиты электрона в изолированном атоме. Полагая $\lambda=2d$, получим: $mv = \pi\hbar / d$. Поэтому $mv^2/2 \approx \pi^2\hbar^2/4md^2$, откуда из сравнения с (10) имеем: $b = \beta\hbar^2\pi^2/4m$, где β – поправочный коэффициент порядка единицы, m - масса электрона.

В общем случае поливалентного металла скорость электронов определяется не средним расстоянием между соседними атомами, а средним расстоянием между соседними валентными электронами, то есть величиной $d/Z_0^{1/3}$, где Z_0 – валентность металла, и тогда $\chi = \beta\pi^2\hbar^2Z^{2/3}/4m$.

Итак, полная энергия металла W складывается из потенциальной энергии (7) кулоновского взаимодействия U и из кинетической энергии (8) коллективизированных электронов E , давление которых соответствует силам отталкивания. Таким образом, для металла с валентностью Z_0 можно записать:

$$-U = -\frac{@Z^2e^2N}{d}$$

и

$$E = \frac{\beta\hbar^2Z^{5/3}N\pi^2}{4m} \cdot \frac{1}{d^2}. \quad (11)$$

Полная энергия металла представляется при этом в виде

$$W = -\frac{C}{d} + \frac{a}{d^2} = -U + E.$$

В то же время в состоянии динамического равновесия для сил взаимодействия электронов металла имеем $mv^2/d = e^2/d^2$, то есть $mv^2 = e^2/d$, следовательно, $2E=U$ и

$$W = -U + E = -E. \quad (12)$$

С использованием (9) (12) примет вид

$$W = -\frac{\text{const}}{V^{2/3}}. \quad (13)$$

С помощью (13) для давления, обусловленного силами сцепления электронов металла через посредство положительных ионов, имеем

$$p_x = -\frac{\partial W}{\partial V} = -\frac{\text{const}}{V^{5/3}}. \quad (14)$$

В терминах относительной плотности будем иметь $p_x = -\text{const} \cdot x^{5/3}$.

При выборе показателя степени для положительной компоненты давления будем руководствоваться принятым [24] значением фактора сжимаемости для металлов. Последнее условие хорошо выполняется для случая, когда $\nu = 7/3$, то есть энергии кулоновского взаимодействия иона с окружением в реальной кристаллической решетке металла наилучшим образом отвечает член мультипольного разложения с потенциалом взаимодействия, пропорциональным $1/d^7$. С учетом вышеуказанного уравнение состояния запишется в виде

$$P = \frac{kT}{V} - \frac{g}{V^{5/3}} + \frac{q}{V^{10/2}}. \quad (15)$$

Переходя к безразмерным переменным, в обозначениях, принятых ранее, для уравнения состояния окончательно имеем

$$p = \frac{\tau x}{z} - Gx^{5/3} + Qx^{10/3}. \quad (16)$$

Новые константы z , G и Q определим, используя условия в критической точке: $(\partial p / \partial x)_\tau = 0$ и $(\partial^2 p / \partial x^2)_\tau = 0$. Фактор сжимаемости $z^{-1} = 25/7$ в этом случае принимает самое близкое к экспериментальным данным значение среди значений, получаемых на основе имеющихся точных решений уравнений состояний, приводимых ранее. С использованием полученных выше констант уравнение состояния (16) перепишем в виде

$$p = z^{-1} \tau x - \frac{21}{25} z^{-1} x^{5/3} + \frac{3}{25} z^{-1} x^{10/3}$$

или

$$p = \frac{25}{7} \tau x - 3x^{5/3} + \frac{3}{7} x^{10/3}. \quad (17)$$

Так же как и в уравнении состояния конденсированной фазы чистого вещества [22], параметры G и Q зависят от температуры. Из условия $\partial p / \partial x|_{T_0} = c_r^2$ (c_r – приведенная скорость звука при нормальных условиях) и $\partial p / \partial x|_{T_c} = 0$ становится ясным, что эта зависимость носит убывающий характер с ростом температуры.

Кроме того, следует заметить, что использование нами этих соотношений связано с тем, что скорость звука в силу своей информативности играет определяющую роль в согласовании термодинамических свойств и построении уравнения состояния [25].

Конкретная зависимость упругой составляющей давления от температуры, пригодная как для жидкой фазы, так и для твердой, может быть выражена в виде неаддитивного вклада в форме экспоненты [22].

Для сил притяжения:

$$f_1(T) = \exp[c_1(1-\tau)]. \quad (18)$$

Для сил отталкивания:

$$f_2(T) = \exp[c_2(1-\tau)]. \quad (19)$$

Тогда упругая составляющая в уравнении состояния примет вид

$$p_x = -Ax^{5/3}e^{c_1(1-\tau)} + Bx^{10/3}e^{c_2(1-\tau)}, \quad (20)$$

где $A = Gf_1(\tau)^{-1}$, $B = Qf_2(\tau)^{-1}$.

Решая систему уравнений $p_x = 0$ при $\tau = \tau_0$, $x = x_0$; $\partial p_x / \partial x = c_r^2$ при $\tau = \tau_0$, $x = x_0$, получим значение констант c_1 и c_2 :

$$c_1 = \frac{1}{1-\tau_0} \ln \frac{3}{5} \frac{c_r^2}{Ax_0^{2/3}}, \quad c_2 = \frac{1}{1-\tau_0} \ln \frac{3}{5} \frac{c_r^2}{Bx_0^{7/9}}. \quad (21)$$

С учетом того, что c_r для большинства металлов имеет небольшой разброс, можно сразу оценить величины констант c_1 и c_2 . Численные значения этих констант незначительно отличаются друг от друга и от тех значений, которые получены другим методом в работах [22] только для одной общей константы.

Поскольку скорость звука – наиболее точно измеряемое акустическое свойство, то по значениям её в широком диапазоне температур и давлений можно строить достаточно достоверную термодинамическую P - V - T -поверхность. Наоборот, если вычислить скорость звука из уравнения состояния для различных температур и затем сравнить с экспериментальными значениями для этих же температур, то можно соответственно сделать вывод об адекватности выбранной модели действительному уравнению состояния.

Так, скорость звука, вычисленная из уравнения состояния (20) для жидких металлов Ag, Cd и Pb, вблизи температуры плавления дает значения, отличающиеся от экспериментальных не более чем на 5–7%. Сравнение проводилось с данными, приведенными в справочнике Кикоина [26].

Выводы. Полученное таким образом уравнение состояния не содержит ни одной подгоночной константы. Все постоянные выражены через критические параметры металлов и скорость звука при нормальных условиях. Естественно, что точность расчетов, проводимых с помощью приведенного уравнения, зависит от точности определения давления, температуры и плотности в критической точке. Оценки параметров в критической точке на основе закона соответственных состояний [14] проводилась при условии, что критический фактор сжимаемости для большой группы металлов является универсальной константой, и его величина принималась равной 0,284. Если исходить из этого положения, то полученное уравнение пригодно для более чем пятидесяти металлов, для которых рассчитывались критические параметры в работе [14]. Уместным будет упомянуть о том, что использовать такое уравнение в двухфазной области жидкость-газ некорректно, так как пользоваться в этой части фазовой диаграммы некоторым общим значением плотности не имеет смысла, а подобная характеристика не имеет отношения к реальным системам и не может быть параметром, характеризующим область фазового перехода [27].

ЛИТЕРАТУРА

1. Мартынюк М.М. Параметры критической точки металлов // ЖТФ. 1983. Т. 57. № 4. С. 810–821.
2. Иванов В.В., Лебедев С.В., Савватимский А.И. Особенности электросопротивления жидкого вольфрама в условиях ограниченного объема и при свободном расширении // ТВТ. 1982. Т. 20. № 6. С. 1093–1097.
3. Колгатин С.Н., Лев М.Л., Перегуд Б.П. и др. Разрушение медных проводников при протекании по ним тока плотностью большей 10^7 А/см² // ЖТФ. 1989. Т. 59. С. 123–133.
4. Симоненко В.А., Синько Г.В. Достижения и проблемы теории уравнений состояния // ТВТ. 1988. Т. 26. № 5. С. 864–873.
5. Калиткин Н.Н. Квазизонное уравнение состояния // Математическое моделирование. 1989. Т. 1. № 2. С. 64–106.
6. Колгатин С.Н., Хачатурьянц А.В. Интерполяционные уравнения состояния металлов // ТВТ. 1982. Т. 20. С. 447–451.
7. Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л., Фортвов В.Е. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. Черноголовка: ИХФ АН СССР. 1988. 325 с.

8. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г. и др. Теплофизические свойства рабочих сред газозофазного ядерного реактора. М.: Атомиздат, 1980. 303 с.
9. Кривицкий Е.В., Шамко В.В., Хайнацкий С.А. Термическое уравнение состояния металлов для динамических задач моделирования разрушения проводников при электровзрыве // Электронная обработка материалов. 2002. № 5. С. 28–31.
10. Куропатенко В.Ф. Уравнение состояния в математических моделях механики и физики // Математическое моделирование. 1993. № 12. С. 48–61.
11. Беннет Ф. Волна испарения // Физика высоких плотностей энергии / Под ред. П.Кальдиролы и Г.Кнопфеля. М.: Мир, 1974. С. 241–257.
12. Воробьев В.С., Малышенко С.П. Равновесие фаз в жидком проводнике с током в геометрии z-пинча // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. Вып. 6. С. 2016–2029.
13. Анисимов М.А., Рабинович В.А., Сычев В.В. Термодинамика кинетического состояния идеальных веществ. М.: Энергоатомиздат, 1990. 200 с.
14. Фортвов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А. Оценка параметров критической точки // ТВТ. 1975. Т. 13. № 5. С. 1072–1080.
15. Сенкевич А.А. Параметры критического состояния и их связь с эффективным потенциалом сил взаимодействия: Отчет Московского Ордена Трудового Красного знамени педагогического института имени Н.К.Крупской. 1987.
16. Колгатин С.Н., Шнейерсон Г.А. Особенности нагрева плазмы при электрическом взрыве проводников в сверхсильном магнитном поле // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. Вып. 5. С. 67–71.
17. Колгатин С.Н., Шнейерсон Г.А. К вопросу о нагреве плазмы индуцированным азимутальным током при электрическом взрыве проводников в сверхсильном магнитном поле // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 1. С. 46–50.
18. Романов Г.С., Сметанников А.С. Численное моделирование слоистого импульсного разряда // ЖТФ. 1981. Т. 51. Вып. 4. С. 678–686.
19. Дресвянников В.И., Тренин В.В. Уравнение состояния металлов для динамических задач магнито-термопластичности с учетом электровзрыва // Прикладные проблемы прочности: Анализ и оптимизация конструкций. Горький, 1989. С. 61–68.
20. Кессельман П.М., Онуфриев И.В. Метод эффективного потенциала в ячеечной модели жидкости. Применение к бинарным жидким системам // Инж.-физ. журн. 1979. Т. 37. № 2. С. 316–323.
21. Кессельман П.М. Модификация ячеечной модели и уравнение состояния жидкости // Инж.-физ. журн. 1988. Т. 50. № 1. С. 65–72.
22. Кессельман П.М., Иншаков С.А., Быков А.Ю. Уравнение состояния твердого тела // ТВТ. 1996. Т. 34. № 3. С. 392–396.
23. Физика взрыва / Под ред. К.П.Станюковича. М.: Наука, 1975. 704 с.
24. Френкель Я.И. Введение в теорию металлов. М.; Л.: ГИТТЛ, 1950. 384 с.
25. Быстров П.И., Каган Д.М., Кречетова Г.А., Шпильрайн Э.Э. Жидкометаллические теплоносители тепловых труб и энергетических установок. М.: Наука, 1988. 384 с.
26. Таблицы физических величин / Под ред. академика И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
27. Базаров И.П., Николаев П.Н. Построение уравнения состояния однородных систем // Журнал физической химии. 1987. 61. № 3. С. 807–809.

Поступила 11.01.10

Summary

Analytical wide-range equation of state for metals, giving a good consent with experimental results in the vast range of parameters of the state of matter, is developed.
