

13. Корнер С. Б., Синицын М. В., Кириллов Г. А., Урлин В. Д. Экспериментальное определение температур ударно-сжатых NaCl и KCl и их кривых плавления до давления 700 кбар. — ЖЭТФ, 1965, т. 48, с 1032.
14. Жарков В. П., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., «Наука», 1968.
15. Demarest H. H., Jr. Hugoniot curves and the Grüneisen parameters at high pressure for the alkali halides. — «J. Phys. Chem. Solids», 1974, vol. 35, p. 1393.

УДК 539.89

УДАРНЫЕ ВОЛНЫ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ЖЕЛЕЗЕ

Н. Х. Ахмадеев, Р. И. Нигматуллин

(Уфа, Москва)

Процессы ударного сжатия некоторых твердых веществ (железо, углерод, KCl, KBr, кварц, многие горные породы) сопровождаются при превышении соответствующих давлений p_s фазовыми переходами, т. е. образованием новых кристаллических фаз [1]. Изменение возникающих при этом волновых конфигураций [2—4] позволило определить характерные времена этих переходов, которые составляют 0,2—0,4 мкс. В [5—7] разработана односкоростная однотемпературная модель двухфазной упругопластической среды, которая использовалась для исследования нестационарных ударных волн в армо-железе с фазовыми переходами, а на основе связи фазовых переходов с упрочнением определена кинетика фазовых превращений $\alpha \rightleftharpoons \varepsilon$ в железе.

В данной работе проводится исследование распространения ударных волн в армо-железе в свете новых экспериментов [3, 4], в которых с помощью манганиновых датчиков и светового интерферометра непосредственно зафиксирована многоволновая структура ударных волн разной интенсивности. В условиях этих экспериментов рассчитано движение ударных волн, на фронте которых происходят фазовые превращения. Исследована и предложена более точная, чем в [6, 7], кинетика фазовых превращений.

1. Основные уравнения в лагранжевых координатах (r, t) для случая одномерного движения при одноосном деформировании имеют вид

$$\begin{aligned}
 (1.1) \quad & (\rho_0/\rho) \partial \rho_1 / \partial t + \rho_1 \partial v / \partial r + (\rho_0/\rho) I_{12} = 0, \\
 & (\rho_0/\rho) \partial \rho_2 / \partial t + \rho_2 \partial v / \partial r - (\rho_0/\rho) I_{12} = 0 \\
 & (\rho_i = \rho_i^0 \alpha_i, \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \rho = \rho_1 + \rho_2, i = 1, 2), \\
 & \rho_0 \partial v / \partial t = \partial \sigma^{11} / \partial r, \\
 & \rho_0/\rho [\rho_1 \partial e_1 / \partial t + \rho_2 \partial e_2 / \partial t + (e_2 - e_1) I_{12}] = \sigma^{11} \partial v / \partial r, \\
 & \sigma^{11} = -p + \tau^{11}, p = p_1(\rho_1^0, T) = p_2(\rho_2^0, T), \\
 & d\tau^{11} / dt = (4/3) \mu (\rho_0/\rho) \partial v / \partial r, \quad \tau^{11} \leq \tau^*,
 \end{aligned}$$

где ρ_i , ρ_i^0 , α_i , e_i — средняя плотность, истинная плотность, объемное содержание и удельная внутренняя энергия i -й фазы; ρ , v , T — плотность, скорость и температура; σ^{11} , τ^{11} , p — тензор напряжений, девиатор напряжений и гидростатическое давление в среде; μ , τ^* — модуль сдвига и предел текучести, для описания которого используется условие текучести

Мизеса; I_{12} — скорость фазовых переходов, для которой выполняются соотношения: $I_{12} = j_{12} - j_{21}$; при $2 \rightarrow 1$ переходе $j_{12} = 0$, $j_{21} > 0$; при $1 \rightarrow 2$ переходе $j_{12} > 0$, $j_{21} = 0$; если нет фазовых переходов, $j_{12} = 0$, $j_{21} = 0$.

Интенсивность рассматриваемых фазовых превращений тем выше, чем больше давление p превышает давление фазового перехода $p_s(T)$, т. е. чем сильнее неравновесность. Такая кинетика, приводящая к запаздыванию превращений и получению метастабильных состояний, имеет место для перехода $Fe^\alpha \rightleftharpoons Fe^\epsilon$. Будем считать [5—7], что скорость фазового превращения зависит от разности термодинамических потенциалов фаз (при одинаковых давлениях и температурах) и от объемного содержания исходной фазы. Кроме того, допускается насыщение скорости фазовых переходов при достаточно больших отклонениях от равновесной линии. Тогда при $j_{12} > 0$ или $j_{21} > 0$ реализуются следующие соотношения:

$$(1.2) \quad \begin{aligned} j_{12} &= \alpha_1 j_{12}^0 \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{p - p_s}{\Delta_{12}} \right)^{n_{12}} \right] \right\}; \\ j_{21} &= \alpha_2 j_{21}^0 \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{p_s - p}{\Delta_{21}} \right)^{n_{21}} \right] \right\}, \end{aligned}$$

где максимальные скорости фазовых переходов определяются значениями j_{12}^0 и j_{21}^0 . В отличие от [5—7] здесь учитывается, что при фиксированном давлении переход $i \rightarrow j$ идет тем быстрее, чем больше содержание исходной i -й фазы.

Кривую фазового равновесия железа в области $\alpha \rightleftharpoons \epsilon$ перехода, которая была получена Кауфманом на основе статистических и динамических данных [8], можно аппроксимировать функцией

$$p_s(T) = K_1 + K_2 T/T_0 + K_3 (T/T_0)^2.$$

Кинетические соотношения (1.2) дают фактический гистерезис фазового превращения, зафиксированный экспериментально, например, в [3].

Уравнение состояния и внутренняя энергия исследуемых материалов представлены в виде трех составляющих, которые описывают упругие свойства холодного тела на гидростатическое сжатие, гармонические колебания атомов в решетке и тепловое возбуждение электронов вместе с ангармоническими эффектами колебаний атомов

$$p(\rho^0, T) = p_p + p_T + p_{ea}; \quad E(\rho^0, T) = e_p + e_T + e_{ea}.$$

В работе [9] для определения $p_p(\rho^0)$ и $e_p(\rho^0)$ предложено использовать потенциал Борна — Майера

$$\begin{aligned} p_p(\rho^0) &= Ax^{-2/3} \exp [b(1 - x^{1/3})] - Kx^{-4/3}, \quad x = \rho_0^0/\rho^0; \\ e_p(\rho^0) &= 3Ab^{-1}\rho_0^{0-1} \exp [b(1 - x^{1/3})] - 3K\rho_0^{0-1} x^{-1/3}. \end{aligned}$$

К сожалению, полученные в [9] коэффициенты A , b , K для одного и того же вещества заметно меняются в зависимости от того, результаты каких экспериментов обрабатываются: статические, динамические или статические и динамические вместе. При численном расчете в диапазоне давлений до 1 мбар целесообразно использовать более простые аппроксимации:

$$\begin{aligned} p_p(\rho^0) &= b_1(1 - x) + b_2(1 - x)^2 + b_3(1 - x)^3; \\ e_p(\rho^0) &= \rho_0^{0-1} (1 - x) \left[\frac{b_1}{2}(1 - x) + \frac{b_2}{3}(1 - x)^2 + \frac{b_3}{4}(1 - x)^3 \right], \end{aligned}$$

что позволяет точно задать значение гидродинамической скорости звука в точке $\rho^0 = \rho_0^0$ и существенно уменьшить объем вычислений без потери точности.

Тепловые составляющие имеют вид

$$p_T = \gamma_T(\rho^0)\rho^0 e_T, \quad e_T = c_v T,$$

где $\gamma_T(\rho^0)$ — коэффициент Грюнайзена [9]; c_v — удельная теплоемкость атомов. Члены p_{ea} и e_{ea} , связанные с тепловым возбуждением электронов и ангармоническими эффектами теплового движения атомов в решетке, становятся существенными при больших давлениях и температурах ($p > 1$ мбар, $T > 10000$ К) и поэтому не учитываются.

2. На основе модели двухфазной упругопластической среды численно решается задача о плоском ударе пластины толщиной l_1 о мишень толщиной $l - l_1$ (ударник и мишень имеют бесконечные поперечные размеры). Известны начальное состояние и граничные условия системы ударник — мишень.

Физико-химические процессы, происходящие при распространении ударной волны в мишени и в ударнике, приводят к возникновению многоволновой картины течения, в процессе которого возникают, взаимодействуют и вырождаются разрывы (ударные волны). Поэтому используется сквозной метод расчета с применением псевдовязкости, позволяющий вести расчет всей области течения единым образом. При построении разностной схемы [6] по методу прямых (или метод частиц) частные производные по r на каждом временном слое аппроксимируются центральной разделенной разностью (второго порядка точности). Это переводит систему дифференциальных уравнений (1.1) с частными производными по r и t в систему из $6N$ (где N — число частиц, на которое разбивается расчетная область по r) обыкновенных дифференциально-разностных уравнений по t , для всех ее функций известны начальные условия в момент удара $t = 0$. Для решения полученной таким образом задачи Коши используется модифицированный метод Эйлера. В разработанной программе реализовано большее число частиц, чем в [5] ($N = 184$). Это позволило более точно вести расчет происходящих процессов, в том числе, что очень важно, фазовых переходов. В уравнении разностной схемы введена (линейная и квадратичная) псевдовязкость, с учетом которой тензор напряжения (в j -й точке временного слоя) имеет вид

$$\sigma^{11} = -p + \tau^{11} - \varphi,$$

а псевдовязкость

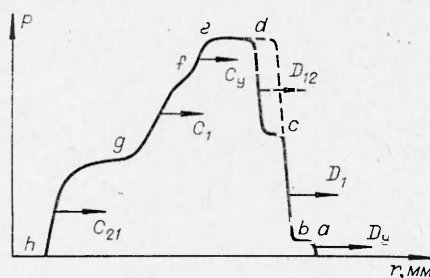
$$\varphi = \rho_0 \Delta r (dv/dr) (c_1 a_0 + c_2 \Delta r |dv/dr|),$$

где c_1 и c_2 — веса линейной и квадратичной псевдовязкости. Для повышения точности расчетов в области разрежения полагалось $\varphi = 0$.

При реализации разностной схемы непосредственно на ЭВМ часть расчетов проводилась с использованием различных конструкций псевдовязкости (в том числе и дифференциального анализатора [10]), чтобы уменьшить ширину переходной зоны до 3—5 частиц.

3. В соответствии с результатами [4—7] ударная волна в упругопластической среде с фазовыми переходами в случае достаточно сильной нагрузки ($p > p_s$) имеет трехволновую конфигурацию как в стадии сжатия, так и в стадии разрежения. На фиг. 1 представлен идеализированный профиль такой ударной волны в виде эпюры давления в некоторый момент времени, где ab — упругий предвестник; D_y — скорость упругого предвестника; bc — первая пластическая волна (переводящая исходную фазу в неравновесное состояние), распространяющаяся со скоростью D_1 ;

cd — вторая пластическая волна или волна фазового превращения, распространяющаяся со скоростью D_{12} ; ef — упругая волна разрежения; fg — пластическая волна разрежения, переводящая вторую фазу в неравновесное состояние; gh — волна разрежения, на которой происходит обратный фазовый переход; C_y , C_1 , C_{21} — соответствующие скорости волны разрежения. Отметим, что при $p > 320$ кбар волны bc и cd имеют одинаковую скорость и поэтому, не расщепляясь, движутся вместе в виде одного скачка bd (отмечено штриховой линией) до тех пор, пока под действием разгрузки давление не станет меньше 320 кбар. Многоволновой характер ударной волны приводит к тому, что волна разгрузки «съедает» волну сжатия поэтапно: сначала волну фазового перехода, затем первую пластическую и, наконец, упругий предвестник.



Фиг. 1

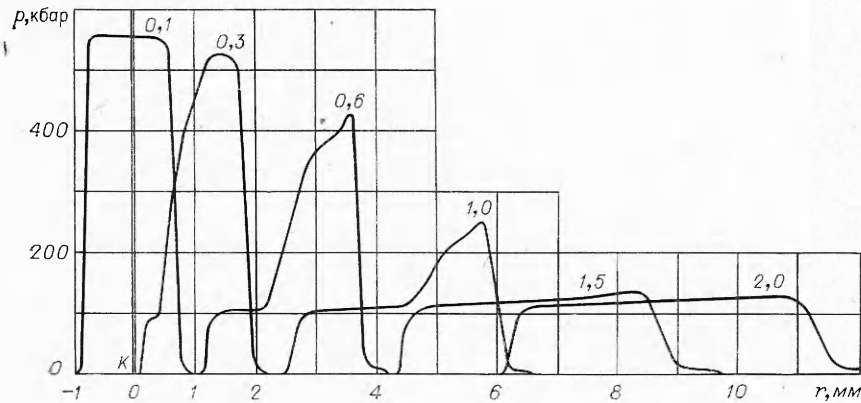
В работе [3] экспериментально были получены профили давления ударной волны в армко-железе и Ст. 3, имеющие многоволновую конфигурацию. Ударная волна инициировалась ударом алюминиевой пластины. Профили давления фиксировались с помощью манганиновых датчиков в форме двойной бифилярной петли на различной глубине в мишени от поверхности соударения. В первой серии опытов алюминиевый ударник имел толщину 1 мм и соударялся с мишенью из Ст. 3 (скорость удара не измерялась). Во второй серии опытов алюминиевая пластина толщиной 7 мм со скоростью $2,11 \pm 0,07$ км/с соударялась с мишенью из армко-железа или Ст. 3. Для условий эксперимента [3] были проведены также две серии расчетов. В первой серии расчетов скорость ударника бралась, согласно оценкам, равной 3,5 км/с, во второй — 2,11 км/с. Во всех расчетах материалом мишени являлось армко-железо. Заметим, что будут сопоставляться расчетные и экспериментальные данные и в тех случаях, когда в расчетах материал мишени — армко-железо, а в экспериментах — Ст. 3 (эти материалы близки по своим физико-химическим свойствам).

Проводились также расчеты движения ударной волны для эксперимента [4], в котором с высокой степенью точности при применении светового интерферометра получен профиль скорости свободной поверхности железной мишени (толщина мишени 3,11 мм). Удар инициировался с помощью пластины из карбида вольфрама, давление соударения составляло 170 кбар.

В [6, 7] кинетика фазовых переходов определялась по глубине зоны постоянного упрочнения в железном образце, где происходило полное фазовое превращение. Полученные же экспериментальные профили давления в [3] и профиль скорости свободной поверхности в [4] позволили по ширине и амплитуде волны фазового превращения на различной глубине железной мишени провести ряд расчетов с целью более точного определения кинетики фазовых переходов. В результате этих расчетов найдены значения кинетических параметров, которые входят в (1.2) и наилучшим образом соответствуют экспериментам [3, 4]

$$(3.1) \quad \begin{aligned} j_{12}^0 &= 6,6 \cdot 10^{10} \text{ кг/м}^3\text{с}, \Delta_{12} = 24 \text{ кбар}, n_{12} = 3, \\ j_{21}^0 &= 3,7 \cdot 10^{11} \text{ кг/м}^3\text{с}, \Delta_{21} = 24 \text{ кбар}, n_{21} = 3. \end{aligned}$$

В целом соотношения (1.2), (3.1) определяют более интенсивную, чем по данным [6, 7], кинетику фазовых превращений в железе.



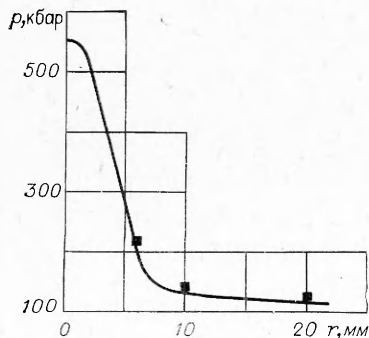
Фиг. 2

На фиг. 2 приведены результаты расчетов в виде эпюры давления для ударника и мишени (первая серия) в различные моменты времени после удара. Точка K соответствует контактной поверхности, разделяющей ударник и мишень. Давление в ударной волне в начальный момент времени достигает 560 кбар, поэтому первая и вторая пластические волны движутся с одинаковой скоростью $D_1 = 6,1$ км/с, которая уменьшается с падением давления, а на расстояниях 5—6 мм начинается расщепление ударной волны на D_1 и D_{12} . Волна разрежения, образуясь за очень малое время (вследствие малой толщины ударника $l_1 = 1$ мм), начинает быстро «съедать» ударную волну: вначале волну, на которой реализуется фазовый переход, затем первую пластическую волну.

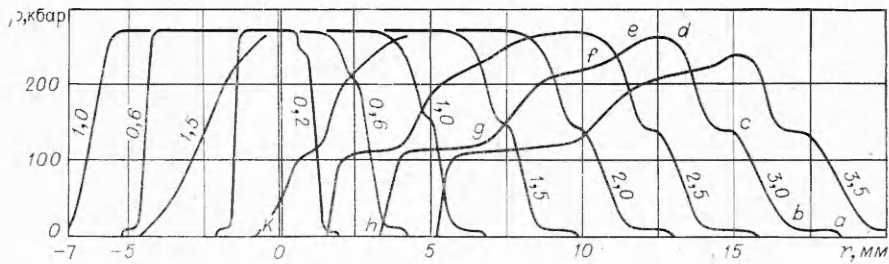
На фиг. 3 видно хорошее согласование для первой серии расчетного (сплошная линия) и экспериментального (в виде точек из [3]) затухания максимального давления по глубине мишени. Интенсивное затухание ударной волны завершается на глубине 7 мм, т. е. в области, где происходили в основном фазовые превращения, и поэтому исследование процессов на расстояниях до 7 мм представляет в данном случае больший интерес, чем на глубине 10 и 20 мм, где происходит медленное затухание первой пластической волны.

Эпюры давления p в различные моменты времени, полученные в расчетах второй серии, представлены на фиг. 4. В момент соударения исходная фаза мишени целиком воспринимает нагрузку, и лишь через некоторое время происходит переход во вторую фазу, приводя к релаксационной разгрузке. Здесь более четко, чем в первой серии, проявляется формирование многоволновой структуры ударной волны в ударнике и мишени. Эпюра давления при $t=3,0$ мкс помечена буквами. При численном расчете с применением псевдовязкости скачок bc имеет конечную толщину, а ширина зоны cd определяется кинетикой фазового превращения.

Расчетные профили давления ударной волны во времени для первой и второй серий показаны сплошной линией на фиг. 5, 6, штриховой линией нанесены экспериментальные профили давления [3] в тех же сечениях мишени. В первой серии кривые



Фиг. 3



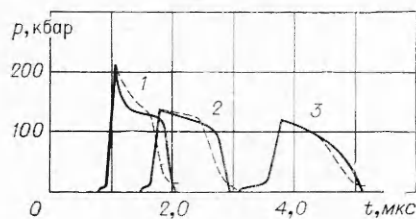
Фиг. 4

1—3 получены на глубине 6, 10 и 20 мм, во второй серии кривые 1—4 — на глубине 4, 11, 12 и 17 мм.

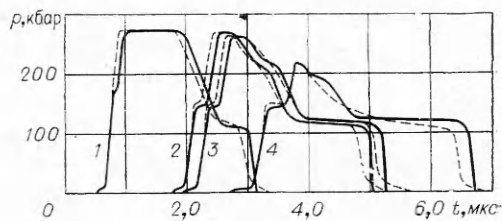
В этих экспериментах момент удара непосредственно не замерялся, и поэтому осциллограммы были расставлены в координатах (p, t) по измеренной скорости первой пластической волны $D_1 = 5,05 \pm 0,07$ км/с, соответствующей давлению на фронте ударной волны 130 кбар. Но скорость D_1 пластической волны bc в первый момент времени определяется давлением удара в данных условиях больше 5,05 км/с. Затем по мере формирования ударной волны D_1 уменьшается. Именно это обстоятельство привело к тому, что расчетные профили давления в фиксированных сечениях мишени в первой и второй сериях опережают обработанные таким образом осциллограммы в тех же сечениях мишени. В связи с этим данные, приведенные в [3], сдвинуты по оси времени t на некоторую величину τ . Для первой серии $\tau_1 = 0,21$, $\tau_2 = 0,28$, $\tau_3 = 0,43$; для второй серии $\tau_1 = 0,15$, $\tau_2 = 0,17$, $\tau_3 = 0,18$, $\tau_4 = 0,22$, (τ , мкс, индекс внизу соответствует номеру кривой на фиг. 5, 6). При численном расчете эксперимента [4], в котором замерялся момент удара, расчетное время выхода ударной волны на свободную поверхность с большой точностью совпадает с экспериментальным.

Как видно из фиг. 5, 6, расчетные профили давления на больших глубинах мишени несколько шире, чем экспериментальные. По-видимому, это можно объяснить тем, что в расчетах моделировался чистый плоский удар (с бесконечными поперечными размерами), а в экспериментах на более поздних временах сказывалось влияние двумерных эффектов в результате боковой разгрузки, ибо диаметр плоского участка в момент соударения составлял 60—65 мм.

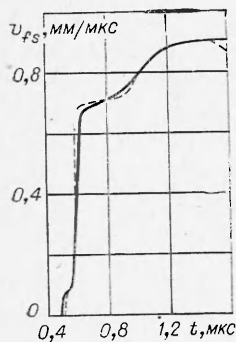
Рассмотрим еще одно важное обстоятельство, касающееся второй серии опытов. Расчеты показывают, что в этих опытах фазовые превращения в мишени, происходящие на фронте ударной волны, должны иметь место на расстояниях меньше 4 мм от поверхности соударения. Однако в экспериментальном профиле, полученном на глубине 4 мм (штриховая линия 1, фиг. 6), волна фазового перехода не выделяется. Это, по-видимому, свя-



Фиг. 5



Фиг. 6



Фиг. 7

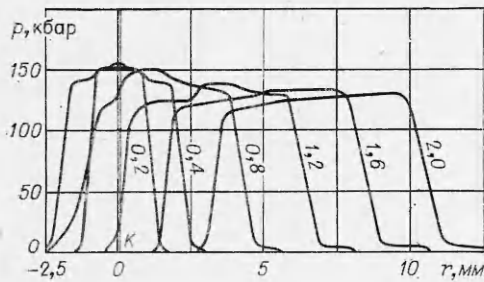
зано с недостаточной разрешимостью опыта, так как, если бы фазовые превращения не происходили, давление на фронте ударной волны здесь было бы несколько больше, чем соответствующее давление на глубине 11 или 12 мм (кривые 2, 3, фиг. 6). Как показали расчеты, выполненные только для первой фазы железа, величина рассогласования должна бы быть ~ 18 кбар. С этой точки зрения большой интерес представляют результаты измерения профиля скорости свободной поверхности железной мишени [4]. При давлении соударения 170 кбар для мишени толщиной 3,11 мм получен четкий трехволновой профиль, свидетельствующий о происходивших на этих расстояниях фазовых превращениях в железе. Точное фиксирование момента удара в [4] позволило оценить среднюю скорость первой ударной пластической волны на данной толщине мишени. Она оказалась равной $\sim 5,3$ км/с. Представленные на фиг. 7 расчетные значения и экспериментальные данные (сплошная и штриховая линии соответственно) говорят о высокой точности расчетов.

Таким образом, численные расчеты ударных волн с фазовыми превращениями и анализ экспериментов [3, 4] дают возможность предположить, что отличие экспериментальной кривой от расчетной на глубине 4 мм (см. фиг. 6) вызвано недостаточной разрешимостью измерений. Это подтверждается тем фактом, что толщина волны фазового перехода на этих расстояниях сравнима с толщиной мanganевого датчика.

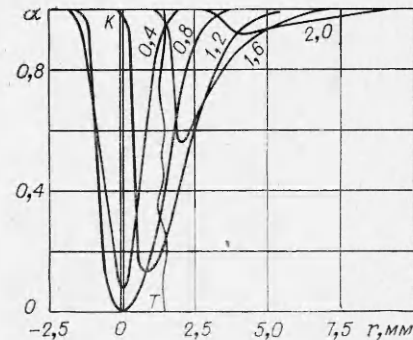
4. Эксперименты по упрочнению железа и малоуглеродистой стали (при давлениях порядка 130 кбар и выше) показали высокую эффективность ударно-волновой обработки по сравнению с другими методами упрочнения (например, холодная прокатка). Высокая чувствительность железа и стали к значительному упрочнению в ударных волнах обусловлена фазовыми переходами, происходящими в испытываемом образце. В работах [6, 7] проведены расчеты движения ударной волны и эксперименты по упрочнению железа при плоском ударе пластины о мишень. Сопоставление расчетных данных с экспериментально замеренной глубиной зоны постоянного упрочнения позволило оценить реальную скорость $\alpha \rightarrow \epsilon$ превращений, причем оказалось, что скорость обратного превращения на порядок выше скорости прямого превращения. Это подтверждено и в настоящих расчетах.

Полученные выше значения кинетических параметров (3.1) использовались при расчете ударных волн разной интенсивности (варьировалась скорость ударника), возникающих в результате удара железной пластины о железную мишень [6, 7]. Результаты расчетов показали, что экспериментально замеренная глубина зоны постоянного упрочнения оказалась заниженной за счет усадки образцов из-за их бокового расширения при боковой разгрузке. Эта усадка в указанных опытах по упрочнению составляла от 2 до 5 мм и должна учитываться при сопоставлении расчетов с экспериментом. Такое сопоставление должно рассматриваться отдельно.

Рассмотрим еще один эксперимент [11] по упрочнению малоуглеродистой стали, в котором осуществлялся плоский удар пластины толщиной 2,5 мм (давление соударения 155 кбар), приводящий к фазовым превращениям в ударной волне. Расчеты, проведенные в этих условиях ($v_0 = 900$ м/с) для ударника и мишени в различные моменты времени, показаны на фиг. 8, 9, где видно, что глубина зоны полного фазового превращения порядка 0,5 мм. Это вызвано тем, что давление на фронте ударной волны (первоначально несколько превышающее давление фазового пере-



Фиг. 8



Фиг. 9

хода) быстро падает как в результате начавшихся фазовых превращений, так и за счет догоняющей волны разгрузки. На глубине 2—3 мм фазовые переходы в мишени не успевают произойти полностью, а к 10—15 мм они прекращаются совсем. Таким образом, можно ожидать, что в данном случае в ударной волне произойдет относительно небольшое увеличение твердости в слоях, близлежащих к поверхности соударения. Этот же результат дает эксперимент (увеличение твердости образца всего на 20% при исходной микротвердости 130 HV), так как практически измерение твердости вследствие технологических особенностей метода происходит на некоторой глубине от поверхности (на фиг. 9 обозначено точкой T), т. е. там, где фазовые превращения происходили не полностью. Поэтому этот экспериментальный факт не противоречит представлению о связи фазовых переходов $Fe^{\alpha} \rightleftharpoons Fe^{\epsilon}$ со взрывным упрочнением.

Поступила 12 X 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Альштулер Л. В. Применение ударных волн в физике высоких давлений. — «Усп. физ. наук», 1965, т. 85, вып. 2.
2. Новиков С. А., Дивнов И. И., Иванов А. Г. Исследование структуры ударных волн сжатия в железе и стали. — ЖЭТФ, 1964, т. 47, вып. 3.
3. Апаньин А. В., Дремин А. Н., Канель Г. И. Структура ударных волн и волн разрежения в железе. — ФГВ, 1973, т. 9, № 3.
4. Barker L. M., Hollenbach R. E. Laser interferometer for measuring high velocities of any reflecting surface. — «J. Appl. Phys.», 1972, vol. 43, N 11.
5. Нигматулин Р. И. Модель движения и ударные волны в двухфазных твердых телах с фазовыми переходами. — ПМТФ, 1970, № 1.
6. Нигматулин Р. И., Скугорова Н. Ф., Холин Н. Н. Волны в сплошных средах. Нестационарные ударные волны и упрочнение. Отчет № 1081, Ин-т механики МГУ, 1970.
7. Grigorian S. S., Rozorezov K. I., Nigmatulin R. I., Skugorova N. F., Kholin N. N. Non-steady shock waves in metals with phase transitions and hardening by explosion. — «Astronautica Acta», 1972, vol. 17.
8. Кауфман Л. Фазовые равновесия и превращения в металлах под давлением. — В кн.: Твердые тела под высоким давлением. М., «Мир», 1966.
9. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнение составления твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., «Наука», 1968.
10. Ивандаев А. И. Об одном способе введения «псевдовязкости» и его применение к уточнению разностных решений уравнений гидродинамики. — «Журн. вычисл. матем. и матем. физики», 1975, т. 15, № 2.
11. Дерibas А. А. Физика упрочнения и сварки взрывом. М., «Наука», 1972.