

مروری بر معادلات حالت مواد منفجره نسوخته

حسین سوری^{۱*}، مهرداد قنبرزاد گلستان^۲

۱- استادیار، ۲- دانشجوی کارشناس ارشد

تهران - دانشگاه صنعتی مالک اشتر

*Email: h.soury@chmail.ir

(تاریخ وصول: ۹۶/۸/۲۲، تاریخ پذیرش: ۹۶/۱۲/۲)

چکیده

برای مدل‌سازی و تحلیل تراک در مواد منفجره، برای بسته شدن دستگاه معادلات حاکم، به معادله حالت مواد نیازمندیم. در بحث مواد پراثری، معادله حالت به دودسته معادله حالت محصولات انفجار و مواد اولیه (نسوخته) تقسیم می‌شود. اغلب متخصصین مدل‌سازی انفجار با معادله حالت محصولات انفجار آشنایی به نسبت خوبی دارند. از این‌رو در این مقاله به معرفی و بررسی معادلات حالت مواد اولیه پرداخته می‌شود. از جمله کاربردهای این معادلات می‌توان به مدل‌سازی آغازش و خاموشی موج تراک، انفجار القایی و... اشاره نمود. همچنین اطلاعات معادله حالت مواد منفجره نسوخته به صورت خاص برای توصیف انتشار تراک غیر ایده‌آل و تراک با جبهه خمیده مورد استفاده قرار می‌گیرد. فرم‌های معروف معادلات حالت مواد اولیه که در اینجا معرفی و بررسی شده‌اند عبارت‌اند از: مای-گرونایزن، مورناتان، بیرچ-مورناتان و رز-وینت.

واژه‌های کلیدی: دتونیشن، تراک، مواد منفجره، معادله حالت، مواد نسوخته.

A review on the Equation of State of Unreacted Explosive Materials

H. Soury^{*}, M. Ghanbarzad Golestan

Maleke Ashtar University of Technology, Tehran, Iran

(Received: 11/13/2017, Accepted: 2/21/2018)

Abstract

For simulation and analysis of detonation in explosive materials, we need to use equation of state (EOS) for closing of the governing equations. In high explosives, the EOS is divided into two categories, EOS of detonation products and unreacted materials. Most of the explosion specialists are familiar with EOS of detonation products. Therefore, this paper is about introducing and investigating the EOS of unreacted explosives. Some of the applications of such equations are modeling of detonation initiation and extinction, sympathetic detonation, etc. Specially, unreacted EOS is used to describe the non-ideal and curved front detonation propagation. Some of the famous unreacted EOS which are investigated here, are: Mie-Gruneisen, Murnaghan, Birch-Murnaghan, and Rose-Vinet.

Keywords: Detonation, Explosive Materials, Equation of State, Unreacted Materials.

۱- مقدمه

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\lambda \rho) + \nabla \cdot (\lambda \rho u) = \rho R \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u u + IP) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot \left[\rho u \left(E + \frac{P}{\rho} \right) \right] = 0$$

که در آن ρ چگالی، λ کسر جرمی محصولات تراک، R نرخ واکنش، u بردار سرعت، P فشار، e انرژی ویژه داخلی، و $E = e + 1/2 \|u\|^2$ انرژی ویژه کل می‌باشند. معادلات فوق را می‌توان به فرم بقایی به صورت زیر نیز نوشت:

$$U_t + \nabla \cdot F(U) = \Omega(U) \quad (2)$$

که در آن $U = (\rho, \lambda \rho, \rho u, \rho E)^T$ بردار متغیرهای بقایی است. در مدل‌سازی تراک در مواد شدیدالانفجار با در نظر گرفتن ناحیه واکنش، برای بسته شدن معادلات (یعنی برابر شدن تعداد مجهولات با تعداد معادله‌ها)، علاوه بر معادلات اولر واکنشی، روابط و معادلات زیر نیز مورد نیاز خواهند بود:

- معادلات حالت
- قواعد مخلوط
- مدل سوزش

دو مورد آخر یعنی قواعد مخلوط و مدل سوزش در این مقاله مورد بحث قرار نمی‌گیرند.

۳- معادلات حالت

در ترمودینامیک از کمیت‌های P ، V و T استفاده می‌شود که همگی کمیت‌های ماکروسکوپی (کمیت‌هایی که وضعیت ماده را در مقیاس بزرگ توصیف می‌کنند) هستند رابطه‌ی بین این کمیت‌ها را معادله حالت ترمودینامیکی گویند. معادله حالت در کنار معادلات بقای جرم، انرژی و مومنتوم به‌عنوان یک معادله کمکی برای مدل‌سازی پدیده‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. معادله حالت در بحث مواد منفجره به دو قسمت تقسیم می‌شود:

- معادله حالت محصولات تراک (سوخته شده)
- معادله حالت مواد اولیه (نسوخته)

از جمله معادله حالت‌های مورد استفاده برای مواد سوخته شده حاصل از انفجار می‌توان به معادلاتی همچون JWL، BKW، HOM و ... اشاره کرد که در این گزارش به این معادلات پرداخته نمی‌شود. در ادامه انواع معادله حالت پرکاربرد برای مواد پرنرزی نسوخته مترکم (غیر گازی) معرفی و مورد بحث قرار می‌گیرند.

معادله حالت رابطه‌ای بین کمیت‌های ترمودینامیکی ماده می‌باشد و صرفاً رابطه‌ای بین دما، فشار و حجم نبوده و می‌تواند کمیت‌هایی از این جنس یا قابل‌تبدیل به این‌ها باشد. معرفی و بررسی معادلات حالت به‌طور کلی به ما امکان استفاده از هر معادله متناسب با شرایط موجود برای محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی و همچنین امکان استفاده به‌عنوان یک معادله کمکی در کنار معادلات بقا و رسیدن به سایر کمیت‌ها را می‌دهد [۱].

در مدل‌سازی عملکرد مواد پرنرزی و در بحث معادلات حالت، بیشترین کاربرد را معادله حالت محصولات واکنش دارد و شاید کم پیش‌آمده باشد که حرفی از معادله حالت مواد نسوخته یا اولیه و حتی اهمیت و کاربرد این معادله به میان آمده باشد. از جمله مواردی که معادله حالت مواد اولیه برای ما اهمیت پیدا می‌کند عبارت‌اند از مدل‌سازی و پیش‌بینی پدیده‌هایی همچون آغازش تراک در چاشنی‌ها و دتوناتورها، انتقال موج تراک بین اجزای زنجیره آتش، خاموشی موج تراک در پشت شکل‌دهنده موج، تحلیل مسیره‌های انفجاری، تحلیل موج تراک همگرا در خرج گود، انفجار ناخواسته در اثر برخورد ترکش و گلوله یا خرج گود به ماده منفجره یا پیش‌رانه جامد، انفجار حرارتی، انفجار القایی^۱ و ... در این پدیده‌ها، فرآیند آغازش مواد پرنرزی با گذر از شاک به تراک (SDT^۲) یا گذر از شعله به تراک (DDT^۳)، و یا زوال و خاموشی موج تراک^۴ اتفاق می‌افتد. طی چنین فرآیندهایی، در ناحیه واکنش، هر دو ماده اولیه و محصولات واکنش به‌صورت هم‌زمان در کنار هم حضور دارند. لذا تنها با اکتفا به معادله حالت محصولات خواص به دست نمی‌آید و باید معادله حالت مواد اولیه نیز استفاده شود. همچنین در مدل‌سازی انتشار تراک با استفاده از هریک از تئوری‌هایی که مستلزم تحلیل ناحیه واکنش باشد، از جمله تئوری ZND^۵، به‌کارگیری معادله حالت مواد اولیه ضروری خواهد بود. در مجموع دلایل بسیاری برای شناخت و بررسی این معادلات وجود دارد که با توجه به این دلایل که در ادامه نیز گفته خواهند شد به معرفی و بررسی روابطی که در حوزه مواد پرنرزی به‌عنوان معادله حالت مواد اولیه کاربرد دارند پرداخته می‌شود [۱ و ۲].

۲- معادلات مورد نیاز برای مدل‌سازی تراک

برای مدل‌سازی تراک، از معادلات چندبعدی اولر واکنشی استفاده می‌شود [۳]:

- 1- Sympathetic Detonation Initiation
- 2- Shock to Detonation Detonation
- 3- Deflagration to Detonation Transition
- 4- Detonation Extinction
- 5- Zeldovich, Neumann, Döring

۴- کاربرد معادله حالت مواد نسوخته

به طور کلی در هر جا که مواد نسوخته تحت فشارهای بسیار زیاد قرار گیرند، برای توصیف رفتار ماده نیاز به معادله حالت است. به عبارتی معادله حالت مواد نسوخته در فشار بالا اساس فهمیدن نیروهای بین مولکولی مولکول‌های انرژی‌زا می‌باشد. همان‌گونه که در مقدمه به صورت فهرست‌وار بیان شد، استفاده از معادله حالت مواد نسوخته یا اولیه در موارد زیر ضروری است:

- در مدل‌سازی و انفجار القایی که یک مهمات یا ماده منفجره ممکن است در اثر شاک یا ترکش ناشی از انفجار مهمات مجاور، منفجر شود.
- در آتش‌سوزی انبار مهمات یا گرم شدن گلوله در لوله سلاح، دما و فشار ماده منفجره در محفظه بسته افزایش یافته و احتمال انفجار وجود داد (پدیده کوک آف^۱).
- در بررسی و مدل‌سازی فرآیند آغازش انفجار در مواد پرنرژی با مکانیسم SDT و DDT در اختیار داشتن معادله‌ای برای بیان ارتباط خواص مواد اولیه ضروری است. این پدیده‌ها در چاشنی‌ها و دتوناتورها و سایر اجزای زنجیره آتش اتفاق می‌افتند.
- در مدل‌سازی انتشار تراک تخت پایا با استفاده از تئوری ZND که مستلزم تحلیل ناحیه واکنش است، معادله حالت مواد نسوخته مورد نیاز خواهد بود.
- اطلاعات معادله حالت مواد منفجره نسوخته به صورت خاص برای توصیف انتشار تراک غیر ایده‌آل و تراک با جبهه خمیده با استفاده از روش‌های مدل‌سازی^۲ DSD و^۳ DNS مورد استفاده قرار می‌گیرد. در مدل‌سازی پدیده خاموشی تراک در مسیرهای انفجاری و پشت شکل‌دهنده موج سرجنگی‌های خرج‌گود، اثرات دیواره بر موج تراک و مدل‌سازی موج تراک همگرا استفاده از این روش‌های مدل‌سازی ضروری است.
- در توسعه مدل‌های سینتیکی و فهمیدن ایمنی و حساسیت مواد منفجره و تجهیزات انفجاری در مراحل زمانی مختلف معادلات حالت مواد اولیه به کار گرفته می‌شوند.
- در مدل‌سازی و تحلیل اثر ضربه یا شاک روی مواد پرنرژی، حتی زمانی که واکنشی صورت نگرفته، به معادله حالت مواد نسوخته نیاز خواهیم داشت. اطلاعات معادله حالت فشار بالا به طور نمونه از اندازه‌گیری هوگونیوت در آزمون‌های موج شاک و به صورت هم‌دما از آزمون‌های فشار بالای استاتیک در دماهای مختلف توسعه یافته است.

۵- معادله حالت مواد نسوخته پر کاربرد

در حالت جامد (و یا رژیم سیال غیر گازی) فشار به صورت مجموع دو ترم بیان می‌شود:

$$P(e,v)=P_T+P_C \quad (3)$$

در رابطه (۳) جزء دمایی P_T به حرکت تصادفی اتم‌ها و مولکول‌ها مربوط است و به ظرفیت گرمایی ویژه $C_v=(\partial e/\partial T)_v$ ارتباط داده می‌شود. P_T تنها بخشی از فشار است که در گازها عمل می‌کند. جزء سرد P_C ناشی از نیروهای بین مولکولی است که در فاصله کم به صورت دافعه و در فاصله زیاد به شکل جاذبه می‌باشد. جزء سرد فشار در حالت بسیار متراکم که در اثر موج تراک در مواد منفجره ایجاد می‌شود، بر جزء دمایی غلبه دارد. P_C و انرژی تراکم سرد مرتبط با آن یعنی e_C ، در دمای صفر مطلق سنجیده می‌شوند و بنابراین تنها تابع حجم ویژه v هستند [۴].

در صورتی که در استخراج فرم معادله حالت از جزء دمایی آن صرف نظر شود، به معادله حالت حاصله در اصطلاح معادله حالت ناکامل^۴ گفته می‌شود. بسیاری از معادلات حالت مورد استفاده برای مواد پرنرژی نسوخته در فشارهای بالا جزء این دسته قرار می‌گیرند. در صورتی که وابستگی فشار به دما نیز در ساختار معادله حالت لحاظ شود، به آن معادله حالت کامل^۵ گفته می‌شود [۴].

فرم‌های مختلفی برای معادله حالت مواد منفجره نسوخته پیشنهاد شده است. از جمله می‌توان به موارد زیر اشاره نمود:

- مای-گرونایزن^۶ [۶ و ۵]
- مورناقان^۷ [۷]
- بیرچ-مورناقان^۸ [۸]
- رز-وینت^۹ [۹]

در ادامه هریک از این فرم‌ها به صورت مختصر معرفی می‌شوند.

۶- معادله حالت مای گرونایزن

معادله حالت مای گرونایزن یکی از معادله حالت‌های مورد استفاده در مواد نسوخته می‌باشد. این معادله رابطه‌ای بین فشار و حجم در دمای داده شده است و برای تعیین فشار در شاک در مواد جامد متراکم شده استفاده می‌شود. معادله مای گرونایزن یک فرم خاص از مدل گرونایزن بوده که اثر تغییر حجم شبکه بلور در خواص ارتعاشی آن وجود دارد. پارامتر گرونایزن یکی از مهم‌ترین خواص ترمودینامیکی یک جامد است [۳]:

$$\Gamma=v(\partial P/\partial e)_v \quad (4-1)$$

در معادله فوق، v حجم ویژه، P فشار و e انرژی داخلی بوده و Γ پارامتر گرونایزن می‌باشد که فشار حرارتی مجموعه اتم‌های در حال

4- Incomplete
5- Complete
6- Mie-Gruneisen
7- Murnaghan
8- Birch-Murnaghan
9- Rose-Vinet

1- Cook-off
2- Detonation Shock Dynamics
3- Direct Numerical Simulation

جدول ۱- فرم صریح فشاری معادلات هم‌دما [۱۲].

معادله حالت	فرم صریح فشاری
مورناقان (مرتبۀ اول)	$P(V) = \frac{K_0}{K'_0} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{K'_0} - 1 \right]$
بیرج-مورناقان (مرتبۀ ۳)	$P(V) = \frac{3}{2} K_0 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{7}{3}} \left(1 - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right) \left[1 + \frac{3}{4} (K'_0 - 4) \left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{-\frac{2}{3}} - 1 \right) \right]$
وینت	$P(V) = 3K_0 \frac{1 - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{1}{3}}}{\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}}} \exp \left[\frac{3}{2} (K'_0 - 1) \left(1 - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \right) \right]$

جدول ۲- فرم صریح حجمی معادلات هم‌دما [۱۲].

معادله حالت	فرم صریح حجمی
مورناقان (مرتبۀ اول)	$V(P) = V_0 \left(\frac{K_0 + K'_0 P}{K_0 + K'_0 P_0} \right)^{-\frac{1}{K'_0}}$
بیرج-مورناقان (مرتبۀ ۳)	معکوس پذیر نیست
وینت	معکوس پذیر نیست

یک قید مهم برای معادلات حالت این است که زمانی که حجم به سمت صفر میل می‌کند فشار نیز بایستی به سمت بی‌نهایت میل نماید [۱۲ و ۱۳]. همان‌طور که در جداول (۱) و (۲) مشخص است، چنین قیدی برای همه معادلات حالت معرفی شده برقرار است. بالین وجود برای معادله بیرج-مورناقان یک قید اضافی روی پارامترها وجود دارد و آن اینکه پتانسیل از لحاظ فیزیکی، واقعی است. منظور از پتانسیل، پتانسیل بین اتم‌ها و مولکول‌ها می‌باشد که در فواصل کم، به صورت دافعه و در فواصل زیاد، به صورت جاذبه وجود [۱۲ و ۱۴].

معادله حالت بیرج-مورناقان برای مقادیر $K'_0 < 4$ از لحاظ ریاضی ناپایدار است. کمتر از این مقدار با اعمال فشار کافی، مدول بالک منفی خواهد شد. ناحیه پایدار برای این معادله حالت، برای جامدات یونی یا جامدات نرم (مانند NaCl)، محدوده $4 < K'_0 < 8$ است. برای جامدات سخت یا خنثی (مانند MgO) ناحیه پایدار در محدوده $6 < K'_0 < 4$ قرار می‌گیرد. اغلب مواد جامد در این محدوده قرار دارند و در نتیجه این معادله حالت برای جامدات قابل استفاده می‌باشد. درحالی‌که برای مایعات که $K'_0 > 7$ است، معادله حالت بیرج-مورناقان غیرقابل اطمینان است [۱۲].

۸- استخراج معادلات حالت هم‌دما

۸-۱- معادله حالت مورناقان

معادله حالت مورناقان را می‌توان با استفاده از تعریف مدول بالک که در جدول (۳) ارائه شده، و با لحاظ نمودن فرض اعمال شده توسط مورناقان مبنی بر اینکه مدول بالک یک رابطه خطی با فشار دارد، به صورت زیر استخراج کرد [۷ و ۱۲]:

ارتعاش را بیان می‌کند. در فرم معمول، پارامتر گرونایزن تنها تابع حجم ویژه در نظر گرفته شده و به صورت زیر می‌باشد:

$$\Gamma(V) = \Gamma_0 (V/V_0)^q \quad (۲-۴)$$

که Γ_0 و q به جنس ماده بستگی دارند.

اگر فرض کنیم که Γ مستقل از P و e باشد با انتگرال گیری داریم [۵، ۶]:

$$P - P_0 = \frac{\Gamma}{V} (e - e_0) \quad (۵)$$

که در معادله (۵)، P_0 و e_0 فشار و انرژی داخلی در حالت مرجع بوده که معمولاً در دمای صفر کلوین در نظر گرفته می‌شود. مقدار این دو وابسته به دما نبوده و معمولاً منحنی هوگونویوت ماده به‌عنوان شرایط مرجع در نظر گرفته می‌شود.

فرم پیشنهادی معادله حالت مای-گرونایزن به صورت زیر می‌باشد [۱۰ و ۱۱]:

$$P = \frac{\rho_0 C_0^2 (\eta - 1) \left[\eta - \frac{\Gamma_0}{2} (\eta - 1) \right]}{[\eta - S(\eta - 1)]^2} + \Gamma_0 E, \quad (۶)$$

$$\eta \equiv \frac{P}{\rho_0}$$

در معادله (۶)، C_0 سرعت صوت بالک، ρ_0 چگالی اولیه، ρ چگالی، Γ_0 گامای گرونایزن در حالت مرجع، $S = dU_S/dU_P$ ضریب شیب هوگونویوت خطی، U_S سرعت موج شاک، U_P سرعت ذره و E انرژی داخلی بر واحد حجم مرجع می‌باشد.

$$E = \frac{1}{V_0} \int C_V dT \approx \frac{C_V (T - T_0)}{V_0} = \rho_0 C_V (T - T_0) \quad (۷)$$

در معادلات (۶) و (۷)، V_0 حجم مرجع در دمای T_0 و C_V ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت است که در بسیاری از شبیه‌سازی‌ها مقدار آن با C_P برابر در نظر گرفته می‌شود [۱۰ و ۱۱].

۷- معادلات حالت هم‌دما (مستقل از دما یا ناکامل)

فرم معمول سه معادله حالت مورناقان، بیرج-مورناقان و رز-وینت جزء معادله حالت‌های ناکامل دسته‌بندی می‌شوند. این معادلات را می‌توان به دو فرم دیفرانسیلی و انتگرالی تقسیم‌بندی کرد.

معادلات حالت وینت و بیرج-مورناقان بر پایه دیفرانسیل انرژی داخلی استخراج شده‌اند [۱۲]:

$$P = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{T=0} \quad (۸)$$

درحالی‌که معادله مورناقان بر پایه فرم انتگرال فشار است:

$$\frac{V}{V_0} = \exp \left[- \int_{P_0}^P \frac{dP}{K(P)} \right] \quad (۹)$$

معادلات حالت وینت و بیرج-مورناقان تنها به فرم صریح فشاری و معادله حالت مورناقان هم به فرم صریح فشاری و هم به فرم صریح حجمی قابل بیان هستند. در جداول (۱) و (۲) هر دو فرم این معادلات حالت ارائه شده است. پارامترهای به کار رفته در این معادلات در جدول (۳) معرفی شده‌اند [۱۲].

$$K(P) = K_0 + K'_0 P \quad (10)$$

با جای گذاری معادله (10) در انتگرال فشار در معادله (9) و انتگرال گیری، معادله زیر به دست می آید:

$$\left(\frac{V}{V_0}\right) = \left(1 + \frac{K'_0}{K_0} P\right)^{-\frac{1}{K'_0}} \quad (11)$$

این فرم پایه، معادله حالت موسوم به مورناقان است. با این وجود، این معادله حالت در تراکم های بالا معتبر نبوده و برای اغلب جامدات در محدوده تراکم کمتر از ۰/۸۵ تا ۰/۹ (نسبت به حجم اولیه)، شروع به انحراف می کند [۱۲ و ۱۵].

در تراکم های بیشتر از این، معادله مورناقان شروع به انحراف قابل توجه نسبت به داده های تجربی می کند. (دقت شود که عدد تراکم نسبی کمتر، نشانگر تراکم بیشتر است) [۱۲ و ۱۶].

جدول ۳- مروری بر خواص حالت ترمودینامیکی با مدنظر قرار دادن فیزیک فاز متراکم در فشار بالا، به همراه توصیف ریاضی آنها. نمادهای داخل پرانتز، نام های دیگر استفاده شده در سایر مراجع می باشد [۱۲].

نام پارامتر	نماد	مشتق	معادل
انبساط حرارتی	α	$V^{-1} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$	معادل
مدول بالک دما ثابت	$K, (K_T, B_T, B)$	$-V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$	معادل
تراکم پذیری دما ثابت	$K, (\beta)$	$-V^{-1} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T$	معادل
بدون نام	αK	$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$	$-\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$
ظرفیت حرارتی حجم ثابت	C_V	$T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V$	معادل
ظرفیت حرارتی فشار ثابت	C_P	$T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P$	معادل
مشتق فشاری مدول بالک	K'	$\left(\frac{\partial K}{\partial P}\right)_T$	معادل
مشتق دمایی مدول بالک	$\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_P$	$\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_P$	معادل
اندرسن-گرونایزن	$\delta, (\delta_T)$	$-\frac{1}{\alpha K} \left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_P$	معادل
گرونایزن	$\gamma, (\gamma^G, \gamma_{mg})$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial U}\right)_V$	$\frac{\alpha K V}{C_V}$
مدول بالک آیزنتروپیک	K_S	$-V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S$	معادل
مشتق ذاتی دمایی K	$\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_V$	$\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_V$	$\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_P + \alpha K \left(\frac{\partial K}{\partial P}\right)_T$

۸-۲- معادله حالت وینت

معادله حالت وینت بر پایه رابطه بین انرژی پیوندی و فاصله بین اتمی بنا گذاشته شده و به فرم بسته زیر ارائه شده است [۹ و ۱۲]:

$$E(a^*) = \Delta E [E^*(a^*)] \quad (12)$$

که a^* جدایش بین اتمی بوده و به صورت زیر تعریف می شود:

$$a^* = \frac{(r_{ws} - r_{wse})}{l} \quad (13)$$

در معادله (۱۲) و (۱۳) $E(a^*)$ انرژی پیوندی، ΔE مقدار فشار صفر، r_{ws} شعاع وینگر-سیتز^۱، r_{wse} شعاع وینگر-سیتز در تعادل و l مقیاس طول می باشد. شعاع وینگر-سیتز، شعاع کره ای است که حجم آن میانگین حجم بر اتم در سیستم مورد نظر است.

فشار در دمای صفر از رابطه زیر به دست می آید:

$$P = -\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{T=0} = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{T=0} = \frac{\Delta E}{4\pi(la^* + r_{ws})^2 l} E^*(a^*) \quad (14)$$

همچنین رابطه نیرو را به صورت زیر می توان نوشت:

$$F(a^*) = 4\pi r_{ws}^2 P(a^*) = \frac{-\Delta E}{l} E^*(a^*) \quad (15)$$

با اعمال قانون هوک در نزدیکی حالت تعادل و اعمال این تقریب برای مواد جامد که $E^*(a^*) \cong -(1 + a^*) \exp(a^*)$ است، در نهایت خواهیم داشت [۴]:

$$P(V) = 3K_0 \frac{1 - \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{1}{3}}}{\left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{2}{3}}} \exp\left[\frac{3}{2}(K'_0 - 1)\left(1 - \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{1}{3}}\right)\right] \quad (16)$$

رابطه (۱۶) به عنوان معادله وینت شناخته می شود.

۸-۳- معادله حالت بیرج - مورناقان

این معادله حالت از انرژی پتانسیل داخلی در جامدات توسعه یافته و بر اساس تئوری کرنش محدود بنانهاده شده است. انرژی یک ماده جامد را می توان توسط انرژی هلمهولتز بیان کرد که برای اکثر مواد جامد دارای سه بخش اصلی به صورت زیر است [۸ و ۱۲]:

$$A = E_{st} + A_{vib} + E_{el} \quad (17)$$

که در آن، A انرژی هلمهولتز، E_{st} پتانسیل شبکه استاتیک در دمای صفر مطلق، A_{vib} انرژی ارتعاشی به دلیل حرکت اتم ها حول یک نقطه شبکه ای، و E_{el} پتانسیل ناشی از الکترون های آزاد است. عوامل دیگری نیز همانند مغناطیسی کردن در این انرژی سهم دارند، اما می توان سهم آن ها را در مقایسه با سایر بخش ها برای مواد جامد ناچیز فرض کرد. برای مواد غیر هادی E_{el} را می توان ناچیز در نظر گرفت.

این تئوری بیان می دارد که انرژی کرنش یک جامد را می توان با استفاده از بسط سری تیلور انرژی نسبت به کرنش اولری، که به صورت زیر تعریف می شود، محاسبه کرد:

$$f = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \quad (18)$$

در دمای صفر و با فرض ناچیز بودن E_{el} ، تابع انرژی می توان به صورت $A \approx E_{st}$ نوشت. حال می توان انرژی هلمهولتز را به صورت بسط سری تیلور کرنش اولری بیان کرد:

$$A = a + bf + cf^2 + df^3 + \dots \quad (19)$$

1- Winger-Seitz

دست‌یابی به خواص ترمودینامیکی نیاز داریم، در بخش مواد اولیه نیز معادله حالت مناسب برای پیش‌بینی اثرات ضربه و شکا وارده مورد نیاز است. بسته به اینکه پارامتر دما در معادله حالت حضور داشته باشد یا نه، معادلات حالت مواد غیر گازی را به دودسته کامل و ناکامل می‌توان تقسیم کرد. معادله حالت مای گرونایزن هر دو فرم کامل و ناکامل را دارد. سایر معادلاتی که در اینجا معرفی شدند، در دسته معادلات حالت ناکامل قرار می‌گیرند. در اغلب موارد می‌توان از جزء دمایی معادله حالت در مواد غیر گازی صرف‌نظر کرد. در جدول ۴ به صورت اجمالی محدوده کاربرد معادله حالت های مورد بررسی در مقاله حاضر با هم مقایسه شده اند.

از میان معادله حالت هایی که در این مقاله معرفی شدند، معادله حالت مای گرونایزن در نرم‌افزارهای تجاری مانند LS-Dyna برای مدل سازی بارگذاری دینامیکی ناشی از انتشار شکا در مواد جامد مورد استفاده قرار گرفته است. از سایر معادله حالت ها در کدهای غیر تجاری و یا تحقیقاتی استفاده شده است.

با توجه به جایگاه مهم مباحث آغازش و خاموشی موج تراک و انتشار تراک غیر ایده‌آل در طراحی مهمات با کارایی بالا، و همچنین لزوم توسعه دانش پیش‌بینی ایمنی مکانیسم‌های حاوی مواد پرنرزی، ورود به موضوع استخراج ضرایب معادلات حالت مواد نسوخته برای مواد پرنرزی تولیدی داخل کشور امری الزامی به نظر می‌رسد.

جدول ۴- مقایسه اجمالی معادلات حالت مواد نسوخته.

نام معادله حالت	محدوده کاربرد
مای گرونایزن	بارگذاری دینامیکی ناشی از شکا و تراک در مواد منفجره متراکم
مورناقان	قابل استفاده تا تراکم کمتر از ۰/۸۵ برای مواد ایزوتروپیک
وینت	قابل استفاده تا تراکم کمتر از ۰/۶۵
بی-رچ- مورناقان	توسعه‌یافته‌ی معادله مورناقان برای مواد تقارن مکعبی

با صرف‌نظر کردن از جمله مرتبه دوم به بعد رابطه (۱۹) و با توجه به این‌که در کرنش صفر، انرژی برابر صفر است خواهیم داشت:

$$A = bf + cf^2 \quad (20)$$

فشار را می‌توان طبق تعریف زیر به دست آورد:

$$p = -\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial A}{\partial f}\right)\left(\frac{\partial f}{\partial V}\right) \quad (21)$$

با جای گذاری رابطه (۲۰) در (۲۱) و مشتق‌گیری داریم:

$$P = b\frac{(1+2f)^{5/3}}{3V_0} + 2cf\frac{(1+2f)^{5/3}}{3V_0} \quad (22)$$

با توجه به اینکه در کرنش صفر، فشار نیز صفر است $b=0$ به دست می‌آید. با استفاده از تعریف مدول بالک که در جدول (۳) آمده، آخرین ضریب مجهول، یعنی c نیز به دست می‌آید.

$$K = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T \quad (23)$$

$$= \frac{2cV}{9V_0}(1+2f)^5[5f(1+2f)^3 + (1+2f)^5]$$

از تخمین مدول بالک K در کرنش صفر، معادله زیر برای فشار به دست می‌آید:

$$P = 3K_0f(1+2f)^2 \quad (24)$$

با جای گذاری تعریف کرنش اولری از رابطه (۱۸) در رابطه (۲۴) معادله بیرچ- مورناقان درجه دو به دست می‌آید:

$$P = \frac{3}{2}K_0\left[\left(\frac{V}{V_0}\right)^{-7/3} - \left(\frac{V}{V_0}\right)^{-5/3}\right] \quad (25)$$

همچنین اگر در رابطه (۱۹) از جمله مرتبه سوم به بعد را صرف‌نظر کنیم و به ترتیب بالا عمل کنیم، معادله بیرچ- مورناقان مرتبه سوم را خواهیم داشت:

$$P = \frac{3}{2}K_0\left[\left(\frac{V}{V_0}\right)^{-7/3} - \left(\frac{V}{V_0}\right)^{-5/3}\right]\left[1 + \frac{3}{4}(K'_0 - 4)\left(\frac{V}{V_0}\right)^{-2} - 1\right] \quad (26)$$

۹- نتیجه‌گیری

همان‌طور که در مدل سازی انبساط محصولات انفجار به معادله حالت جهت

مراجع

- [1] Mader, C. L. "Numerical Modeling of Explosives and Propellants"; CRC Press: London, 2008.
- [۲] امامی کوپائی، سبحان؛ مظاهری، کیومرث؛ سوری، حسین " بررسی مقایسه ای مدل های سوزش برای مواد شدیدالانفجار "؛ مجله تحقیق و توسعه مواد پرنرزی، سال چهارم، شماره ۲ (شماره پیاپی ۷)، صفحه ۲۹، ۱۳۸۷.
- [3] Arienti, M.; Morano, E.; Shepherd, J. E. "Shock and Detonation Modeling with the Mie-Gruneisen Equation of State"; Report FM99-8, Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, USA, 2004.
- [4] Zharkov, V. N.; Kalinin, V. A. "Equations of State for Solids at High Pressures and Temperatures"; Consultants Bureau, New-York, 1971.
- [5] Roberts, J. K.; Miller, A. R. "Heat and Thermodynamics"; Vol. 4, Interscience Publishers, 1954.
- [6] Burshtein, A. I. "Introduction to Thermodynamics and Kinetic Theory of Matter"; Wiley-VCH, 2008.
- [7] Murnaghan, F. D. "The Compressibility of Media under Extreme Pressures"; Proc. of the National Academy of Sciences of the United States of America 1944, 30, 244-247.

- [8] Birch, F. "Finite Elastic Strain of Cubic Crystals"; Phys. Rev., 1947, 71 (11), 809–824.
- [9] Vinet, P.; Smith, J. R.; Ferrante, J.; Rose, J. H. "Temperature Effects on the Universal Equation of State of Solids"; Phys. Rev. B., 1987, 1945–1953.
- [10] Zocher, M. A.; Maudlin, P. J. "An Evaluation of Several Hardening Models Using Taylor Cylinder Impact Data"; Proc. of the Computational Methods in Applied Sciences and Engineering Conference 2000, 05-12.
- [11] Wilkins, M. L. "Computer Simulation of Dynamic Phenomena"; Springer, Berlin, 1999.
- [12] Nogva, S.E. "High Pressure Equation of State for Condensed Phase Thermodynamics"; Report, Norwegian University of Science and Technology, 2012.
- [13] Chauhan, R. S.; Lal, K.; Singh, C. P. "Inverted Equations of State for Solids Under High Pressures"; IJPCV.2011, 85, 9, 1341-1366.
- [14] Hofmeister, A. M. "Interatomic Potentials Calculated from Equations of State: Limitation of Finite Strain to Moderate K"; Geophys. Res. Lett. 1993, 20, 7, 635-638.
- [15] Plymate, T. G.; Stout, J. H. "A Five-Parameter Temperature-Corrected Murnaghan Equation for P-V-T Surfaces"; J. Geophys. Res. 1989, 94, B7, 9477-9483.
- [16] Fuchizaki, K. "Murnaghan's Equation of State Revisited"; J. Phys. Soc. Jpn. 2006, 75, 3.