

## Железо при больших отрицательных давлениях

С. В. Разоренов<sup>1)</sup>, Г. И. Канель, В. Е. Фортон

Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

Институт теплофизики экстремальных состояний РАН, 127412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 июля 2004 г.

С целью проверки наличия области аномальной сжимаемости железа при отрицательных давлениях, предсказанной первопринципными расчетами, проведена регистрация отражения импульсов сжатия в монокристаллах железа от поверхности образцов. В диапазоне достигнутых растягивающих напряжений до 7.6 ГПа не обнаружено признаков ожидавшегося формирования ударных волн разрежения. Значения разрушающих напряжений достигают 25–50% предельной теоретической прочности железа при длительности нагрузки  $\sim 10^{-8}$  с. Зависимость сопротивления разрушению от скорости растяжения не выявляет каких-либо особенностей в области предполагаемой аномалии сжимаемости железа.

PACS: 62.20.Mk, 62.50.+p, 64.30.+t

Современная техника экспериментов с ударными волнами позволяет проводить исследования свойств материалов при отрицательных давлениях до  $-15$ – $20$  ГПа и более [1–3]. При этом анализ состояний вещества в области растяжения основан непосредственно на фундаментальных законах сохранения с использованием экстраполяции данных об уравнении состояния при больших сжатиях. Более надежным способом объективной оценки уравнения состояния вещества при больших, вплоть до спинодали, отрицательных давлениях в настоящее время являются первопринципные расчеты. Так, например, в рамках теории функционала плотности с обобщенными градиентными поправками рассчитана [4] нулевая изотерма алюминия, которая не содержит каких-либо особенностей и имеет минимум при давлении  $-11.2$  ГПа. Экстраполяция ударной адиабаты алюминия дает близкое значение давления в минимуме, равное  $-13.4$  ГПа. Делаются первые попытки измерений сжимаемости твердых тел [5] и жидкостей [6] при отрицательных давлениях, однако предложенные методы имеют пока ограниченный диапазон применимости.

Недавние первопринципные расчеты нулевой изотермы железа [7] обнаружили ее аномальное поведение в области отрицательных давлений. Результаты расчетов, показанные на рис.1, демонстрируют скачок объема, связанный с перестройкой энергетического спектра кристалла при давлении  $-3.4$  ГПа, и минимум при  $-13.4$  ГПа. Экстраполяция ударной адиабаты  $\alpha$ -железа [8] дает минимум при  $-31.6$  ГПа, что в 2.3 раза отличается от первопринципных расчетов.

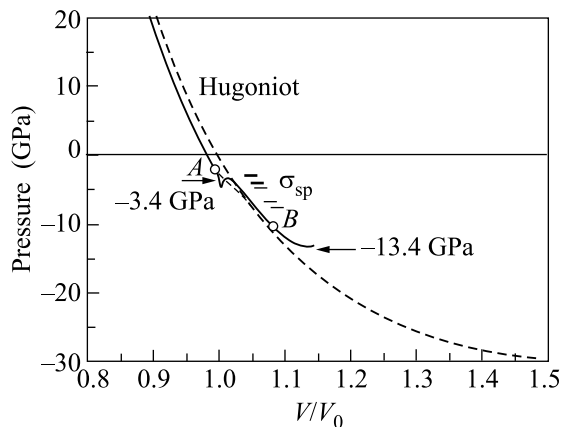


Рис.1. Расчетная [7] нулевая изотерма (сплошная линия) и экстраполированная ударная адиабата  $\alpha$ -железа [8] (штриховая линия).  $V_0$  – удельный объем при 293 К и нулевом давлении. Черточками показаны измеренные значения разрушающих напряжений (откольной прочности) железа при различных длительностях ударно-волновой нагрузки.  $AB$  – область аномальной сжимаемости, где ожидалось формирование ударной волны разрежения

Наличие участка аномальной сжимаемости в окрестности  $-3.4$  ГПа должно приводить к образованию ударных скачков при распространении волн разрежения в железе, что дает возможность экспериментальной проверки наличия этой аномалии. С этой целью проведена серия экспериментов, результаты которых представлены в данной работе.

Растягивающие напряжения (отрицательные давления) создавались в исследуемых плоских образцах железа при отражении от их поверхности импульсов одномерного сжатия субмикросекундной длительности

<sup>1)</sup>e-mail: razsv@fcp.ac.ru

ти. Имевшийся лист железа чистотой 99.98% и толщиной 0.8 мм содержал зерна произвольной ориентации с поперечными размерами до 5–8 мм. Образцы толщиной 0.2–0.75 мм и диаметром 12–15 мм вырезались таким образом, чтобы содержать в центральной части одно крупное зерно. Тем самым исключалась возможность преждевременного инициирования разрушения на межзеренных границах в контролируемой центральной области образца. Импульсы сжатия генерировались ударом алюминиевой пластины, разогнанной с использованием взрывного устройства [3]. Толщина пластины-ударника варьировалась от 50 мкм до 400 мкм; скорость соударения составляла  $650 \pm 50$  м/с или  $1200 \pm 50$  м/с. В экспериментах регистрировалась скорость свободной тыльной поверхности образца как функция времени,  $u_{fs}(t)$ . Измерения проводились с использованием лазерного доплеровского измерителя скорости VISAR [3, 8] при временном разрешении 0.4 нс.

На рис.2 приведены примеры измеренных профилей скорости свободной поверхности образцов желе-

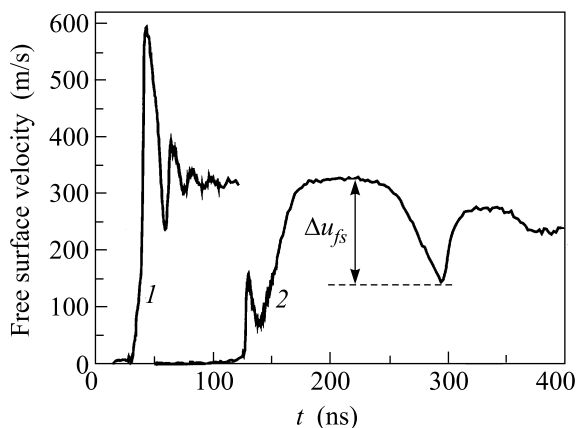


Рис.2. Профили скорости свободной поверхности пластин высокочистого железа толщиной 0.19 (1) и 0.77 мм (2) при ударе алюминиевыми пластинами толщиной 0.05 мм и 0.4 мм со скоростью 1200 м/с и 650 м/с, соответственно

за при десятикратном различии длительностей ударной нагрузки. На волновых профилях регистрируется выход на поверхность упругопластической волны сжатия и части следующей за ней волны разрежения. После отражения импульса сжатия от свободной поверхности внутри образца генерируются растягивающие напряжения, в результате чего инициируется его разрушение – откол. При этом происходит релаксация растягивающих напряжений и формируется волна сжатия (откольный импульс), выход которой на поверхность образца вызывает второй подъем

ее скорости. Декремент скорости поверхности при ее спаде от максимума до значения перед фронтом откольного импульса пропорционален величине разрушающего напряжения в данных условиях нагружения. Последующие колебания скорости поверхности есть результат многократных отражений волн внутри откалывающегося слоя образца между его тыльной поверхностью и поверхностью разрушения.

Измеренные профили скорости свободной поверхности образцов железа, в целом, подобны полученным для других металлов [3] и не содержат каких-либо свидетельств формирования ударных волн разрежения. Анализ волновых профилей позволяет определить с высокой точностью величину разрушающих напряжений – откольную прочность материала. Значение откольной прочности  $\sigma_{sp}$  рассчитывается на основании анализа взаимодействия падающей и отраженной волн [3, 9] по величине спада скорости поверхности  $\Delta u_{fs}$  от максимума до значения перед фронтом откольного импульса. В акустическом приближении

$$\sigma_{sp} = \frac{1}{2} \rho_0 c_b (\Delta u_{fs} + \delta),$$

где  $\rho_0$  – плотность материала,  $\delta$  – поправка на искажение профиля скорости вследствие различия скоростей фронта откольного импульса, распространяющейся по растянутому материалу ( $c_t$ ), и скорости пластической части падающей волны разгрузки перед ней ( $c_b$ ). В данной работе величины разрушающих напряжений определялись с учетом нелинейной сжимаемости материала [3], для чего уравнение состояния материала экстраполировалось в область растяжения. Соответствующие значения отрицательного давления при разрушении отличаются от  $\sigma_{sp}$  на 2/3 предела текучести. Различие между величинами давления и напряжения при разрушении не превышает 10%.

Результаты измерений суммированы на рис.3 в виде зависимости откольной прочности железа от скорости растяжения в падающем импульсе ударной нагрузки  $\dot{V}/V_0$ , которая рассчитывается как

$$\dot{V}/V_0 = \dot{u}_1/2c_b.$$

где  $\dot{u}_1$  – измеренный градиент скорости свободной поверхности в разгрузочной части падающего импульса сжатия. Фактически эти значения скорости деформирования с точностью до постоянного множителя порядка нескольких единиц равны скорости роста объема несплошностей в материале на начальной стадии его откольного разрушения [3].

С увеличением скорости растяжения от  $\sim 10^5$  с<sup>-1</sup> до  $\sim 5 \cdot 10^6$  с<sup>-1</sup> сопротивление разрушению железа

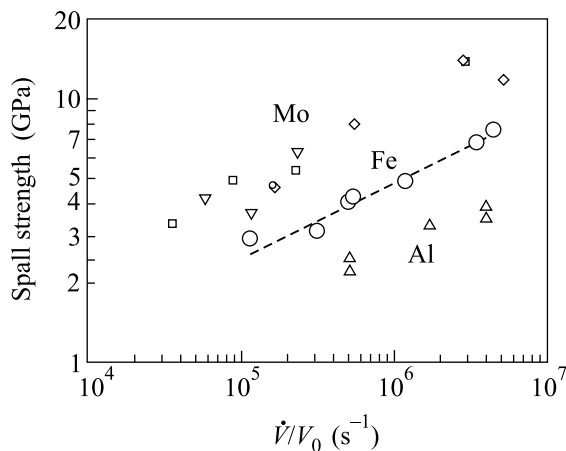


Рис. 3. Зависимость откольной прочности железа от скорости деформирования. Пунктиром показана аппроксимация данных зависимостью  $\sigma_{sp} = 0.89(\dot{V}/V_0)^{0.29}$ . Для сравнения представлены результаты подобных измерений для монокристаллов молибдена различной ориентации [1] и алюминия [2]

возрастает от 2.9 ГПа до 7.6 ГПа, а толщина откола уменьшается от  $-400$  мкм до 40 мкм. В этом диапазоне результаты измерений аппроксимируются зависимостью  $\sigma_{sp} = 0.89(\dot{V}/V_0)^{0.29}$  (ГПа), показанной на рис.3 пунктиром. Сопоставление с подобными данными для монокристаллов молибдена [1] и алюминия [2] демонстрирует подобие зависимостей откольной прочности от скорости растяжения и не выявляет каких-либо особенностей в области предполагаемой аномалии сжимаемости железа.

Как показано на рис.1, диапазон достигнутых значений растягивающих напряжений значительно перекрывает область аномалии на расчетной нулевой изотерме железа. Поскольку электронные топологические переходы [7] должны быть практически безинерционными, представляется маловероятным, что связанная с ними аномалия сжимаемости не проявилась из-за малой длительности действия отрицательных давлений. В то же время, расчеты электронной структуры кристаллов железа проведены [7] для изотермы 0 К, в то время как представленные здесь эксперименты выполнены при комнатной температуре. Возможно, аномалия сжимаемости железа имеет место только при пониженных температурах и исчезает с нагревом. В этом случае неустойчивость кристаллической структуры может быть одним из факторов, определяющих явление хладноломкости железа.

Положение спинодали конденсированной фазы вещества определяет теоретически предельную или "идеальную" прочность материала на растяжение.

Если 0 К изотерма железа действительно имеет минимум при  $-13.4$  ГПа, как это следует из первопринципных расчетов [7], то, согласно измерениям,  $\sim 55\%$  предельной прочности железа реализуется при длительности действия растягивающих напряжений  $\sim 10^{-8}$  с. В то же время, сопоставление максимального измеренного сопротивления откольному разрушению с оценкой предельной прочности путем экстраполяции ударной адиабаты показывает, что в проведенных экспериментах реализовано  $\sim 24\%$  идеальной прочности железа. Подобные оценки для молибдена [1] и алюминия [2] дают 25% и 29%, соответственно.

Таким образом, ударно-волновые эксперименты, проведенные при комнатной температуре, не подтвердили наличия аномалии сжимаемости железа в области отрицательных давлений, которая предсказывается первопринципными расчетами. Авторы намерены продолжить экспериментальные исследования при пониженных температурах. При длительностях ударно-волновой нагрузки порядка  $10^{-8}$  с реализованы значения разрушающих напряжений, сопоставимые с предельной теоретической прочностью железа.

Работа выполнена в рамках проекта Российского фонда фундаментальных исследований # 03-02-16379 и программы фундаментальных исследований Президиума РАН "Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий". Авторы выражают благодарность Г. В. Синько и Н. А. Смирнову, предоставившим результаты первопринципных расчетов сжимаемости железа до их опубликования.

1. G. I. Kanel, S. V. Razorenov, A. V. Utkin et al., J. Appl. Phys. **74**, 7162 (1993).
2. G. I. Kanel, S. V. Razorenov, K. Baumung et al., J. Appl. Phys. **90**, 136 (2001).
3. T. Antoun, L. Seaman, D.R. Curran et al., Spall Fracture. Springer, New York, 2003.
4. Г. В. Синько, Н. А. Смирнов, Письма в ЖЭТФ **75**, 217 (2002).
5. Г. С. Безручко, Г. И. Канель, С. В. Разоренов, Теплофизика высоких температур **42**, 262 (2004).
6. A.D. Alvarenga, M. Grimsditch, and R.J. Bodnar, J. Chem. Phys. **98**, 8392 (1993).
7. Г. В. Синько, Н. А. Смирнов, Письма в ЖЭТФ **79**, 665 (2004).
8. L.M. Barker and R. E. Hollenbach, J. Appl. Phys. **45**, 4872 (1974).
9. Г. И. Канель, ПМТФ **42**, 194 (2001).