

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОПРАВОЧНОГО КОЭФФИЦИЕНТА КРИСТАЛЛА ФТОРИДА ЛИТИЯ В ПРОЦЕССЕ ЕГО УДАРНОГО СЖАТИЯ И ИЗОЭНТРОПИЧЕСКОЙ РАЗГРУЗКИ

А.В. Красильников<sup>1</sup>, Е.И. Несмиянов<sup>1,2</sup>, Е.С. Шестаковская<sup>2</sup>, А.Г. Попцов<sup>1</sup>,  
А.Е. Ковалев<sup>1</sup>, А.П. Яловец<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация

<sup>2</sup> Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация  
E-mail: shestakovskaiaes@susu.ru

**Аннотация.** Монокристалл фторида лития (LiF) является широко используемым материалом в опытах при интенсивных динамических нагрузках в качестве окна для оптических методик, таких как VISAR или PDV. Он прозрачен и не испытывает фазовых переходов при ударном сжатии до ~200 ГПа. Для интерпретации экспериментальных данных, полученных с использованием такого окна, необходимо вводить поправочный коэффициент. Он связывает видимую массовую скорость, полученную экспериментально, с истинной массовой скоростью. Если для стационарных ударных волн этот коэффициент является постоянным, то для более сложных течений на него оказывает влияние пространственная неоднородность плотности окна. В работе проведены экспериментальные исследования ударно-волновых процессов во фториде лития при ударно-волновом сжатии при нагружении до 90 ГПа. Проведено математическое моделирование экспериментов. Для этого построена математическая модель одномерных упруго-пластических течений среды с использованием модели пластичности Прандтля–Рейса, а также построено уравнение состояния фторида лития. Поправочный коэффициент получен двумя способами: на основе зависимости показателя преломления от плотности и закона сохранения массы на ударной волне и зависимости оптической длины пути лазерного луча от распределения плотности в исследуемом материале.

*Ключевые слова:* математическое моделирование; показатель преломления; фторид лития; экспериментальные исследования; лазерные методики.

### Введение

Для исследования поведения материалов при динамических нагрузках применяются различные оптические методы. Широкое распространение получили метод лазерной интерферометрии [1] и, в частности, методика PDV, в которых используется оптическое окно [2]. Распространение по веществу ударной волны сопровождается увеличением его плотности и температуры, изменением ряда других свойств, в том числе оптических. Следовательно, понимание изменения показателя преломления материалов прозрачных окон при ударной нагрузке имеет решающее значение для правильной интерпретации таких экспериментальных данных [1–4].

Фторид лития часто используется в качестве оптического окна, поскольку остается прозрачным для методик измерений при ударно-волновом нагружении до 200 ГПа. В этом диапазоне напряжений LiF имеет упругоэластический отклик с очень низким (< 0,5 ГПа) упругим предвестником и не демонстрирует никаких известных фазовых превращений. Однако, поскольку зависимость показателя преломления LiF от плотности не соответствует соотношению Гладстона–Дейла, измеренная массовая скорость на контактной границе «образец – окно» не является истинной массовой скоростью и ее необходимо скорректировать [5]. По этой причине измеренную скорость в экспериментах такого типа часто называют кажущейся скоростью.

Существует большое количество работ, посвященных исследованию оптических свойств фторида лития [6–11]. В настоящее время появляются новые экспериментальные данные по ударному сжатию до давлений порядка 210 ГПа [12–16] и данные по адиабатическому сжатию до 900 ГПа [17–19]. Каждая из работ направлена на установление или уточнение зависимости показателя преломления от плотности и зависимости истинной скорости от кажущейся.

Данная работа также вносит вклад в исследование оптических свойств фторида лития и направлена на исследование поправочного коэффициента кристалла фторида лития [100] при ударном сжатии и изоэнтропической разгрузке в широком диапазоне давлений.

## 1. Определение показателя преломления фторида лития

Кажущаяся массовая скорость определяется экспериментально. Схема эксперимента приведена на рис. 1.

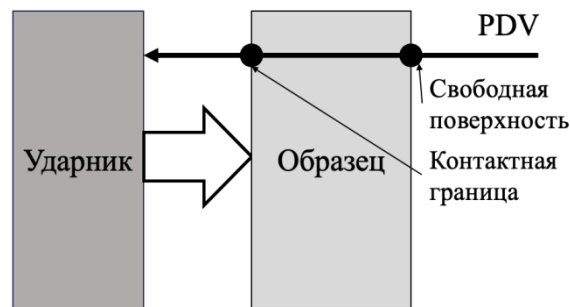


Рис.1. Схема эксперимента

Согласно [3, 20] кажущаяся скорость  $U_{app}$  связана с истинной скоростью  $U_{true}$  следующим выражением:

$$U_{app} = U_{true} n_s - D(n_s - n_0), \quad (1)$$

где  $D$  – скорость ударной волны (УВ),  $n_s$  – показатель преломления на фронте УВ,  $n_0$  – показатель преломления при нормальных условиях.

Зависимость между показателем преломления  $n_s$  и плотностью  $\rho$  может быть описана в виде [6]

$$n_s = n_0 + \frac{dn}{d\rho}(\rho - \rho_0), \quad (2)$$

где  $\rho_0$  – плотность при нормальных условиях.

Зависимость (2) представляет собой уравнение прямой, где  $dn/d\rho$  – тангенс угла наклона. Эта величина дает количественную оценку изменения показателя преломления от плотности. Считается, что  $dn/d\rho$  является константой и уникально для каждого вещества. Обозначим  $dn/d\rho = k/\rho_0$ , где  $k$  – некоторый коэффициент. Тогда выражение (2) примет вид

$$n_s = n_0 - k + k \frac{\rho}{\rho_0}. \quad (3)$$

С учетом закона сохранения массы на ударной волне [1]

$$\rho_0 D = \rho(D - U)$$

выражение (1) примет вид

$$U_{app} = (n_0 - k)U_{true}.$$

Вводя обозначение  $a = n_0 - k$ , получим связь между кажущейся и истинной скоростью

$$U_{app} = aU_{true}, \quad (4)$$

где  $a$  – поправочный коэффициент. Если зависимость  $n(\rho)$  удовлетворяет соотношению Гладстона–Дейла, то коэффициент  $a = 1$  и кажущаяся скорость является истинной.

На рис. 2 представлены значения показателя преломления в зависимости от плотности, полученные из экспериментов по ударному сжатию фторида лития. С использованием эксперимен-

тальных данных [15] путем интерполяции с помощью метода наименьших квадратов можно определить коэффициенты, входящие в выражение (2):

$$n = 1,3827 + 3,99 \cdot 10^{-2} \cdot (\rho - 2,68) = 1,2758 + 3,99 \cdot 10^{-2} \cdot \rho. \quad (5)$$

Тогда из зависимости (5) можно найти значение поправочного коэффициента

$$a = n_0 - \frac{dn}{d\rho} \rho_0 = 1,3827 - 0,0399 \cdot 2,68 = 1,2758. \quad (6)$$

Полученное значение согласуется с результатами других исследований [5], где поправочный коэффициент был найден как отношение кажущейся и истинной скорости (рис. 3).

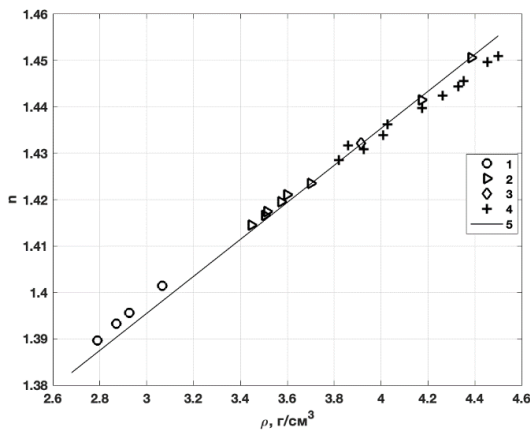


Рис. 2. Зависимость показателя преломления фторида лития от плотности при ударном сжатии. Здесь 1 – [21], 2 – [5], 3 – [22], 4 – [15], 5 – расчет по формуле (5)

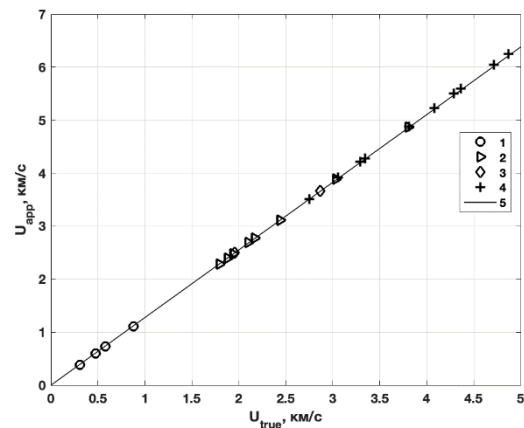


Рис. 3. Зависимость истинной скорости от кажущейся при ударном сжатии. Здесь 1 – [21], 2 – [5], 3 – [22], 4 – [15], 5 – расчет по формуле (4)

Кроме того, кажущуюся скорость можно определить другим способом, поскольку она представляет собой скорость изменения во времени оптической длины исследуемого материала:

$$U_{app} = -\frac{dZ}{dt}. \quad (7)$$

Здесь  $Z$  – оптическая длина пути, которая определяется как

$$Z(t) = \int_L n(x,t) dx, \quad (8)$$

где  $n(x,t)$  – распределение показателя преломления в веществе,  $L$  – длина образца LiF.

При ударно-волновом нагружении в кристалле реализуются распределение плотности  $\rho(x,t)$  по пространственной координате и времени, которые можно получить в гидродинамических расчетах. С учетом этого факта и выражения (5) формула (8) для определения оптической длины пути в расчёте примет вид

$$Z(t) = \int_0^L (1,2758 + 3,99 \cdot 10^{-2} \cdot \rho(x,t)) dx. \quad (9)$$

Выражение (7) можно переписать, используя метод конечных разностей. Тогда кажущаяся массовая скорость в численных расчетах будет определяться как

$$U_{app} = -\frac{Z(t+d\tau) - Z(t)}{d\tau}, \quad (10)$$

где  $d\tau$  – шаг по времени.

## 2. Математическая модель

Система уравнений, описывающая одномерные упругопластические течения, в декартовых координатах имеет вид

$$\dot{\rho} = -\rho \frac{\partial v}{\partial z}, \quad \rho \dot{v} = \frac{\partial}{\partial z} (S_{zz} - P), \quad \rho \dot{E} = (-P + S_{zz}) \frac{\partial v}{\partial z}, \quad \dot{S}_{zz} = \frac{4\mu}{3} \frac{\partial v}{\partial z}, \quad (11)$$

где  $\rho, v$  – плотность и массовая скорость;  $\mu$  – модуль сдвига,  $P, S_{zz}$  – давление и тензор девиатора напряжений;  $E$  – удельная внутренняя энергия.

Система (11) записана с учетом необратимости реальных физических процессов, для чего в уравнениях использованы неравновесные напряжения, которые учитывают конечное время релаксации системы к равновесному состоянию [23, 24]. Для описания пластических течений применяется модель Прандтля–Рейса [25, 26].

Для численного решения предложенной математической модели использовался полуаналитический метод [23], отличительной особенностью которого является то, что только пространственные производные заменяются конечными разностями. В этом случае система уравнений механики сплошной среды (МСС) сводится к системе дифференциальных уравнений, которые допускают приближенное аналитическое решение на некотором временном шаге.

Система уравнений (11) должна быть дополнена соответствующими начальными и граничными условиями, которые берутся из конкретной постановки задачи, и уравнениями состояния веществ. Для описания поведения LiF в данной работе построено малопараметрическое уравнение состояния (УРС) в форме Ми–Грюнайзена

$$P = P_X + \frac{\Gamma(V)}{V}(E - E_X), \quad (12)$$

где  $E_X$  и  $P_X$  – холодные (упругие) составляющие удельной внутренней энергии и давления,  $V$  – удельный объем. Зависимости  $E_X(V)$  и  $P_X(V)$  возьмем в виде

$$P_X = B_0 \rho_0 c_0^2 \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^n - 1 \right], \quad E_X = - \int_{V_0}^V P_X dV = B_0 c_0^2 \left\{ \frac{1}{n-1} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{n-1} - 1 \right] - 1 + \frac{V}{V_0} \right\},$$

где  $B_0, n$  – коэффициенты УРС,  $c_0$  – продольная составляющая скорости звука,  $V_0$  – удельный объем при нормальных условиях.

Коэффициент Грюнайзена имеет вид [27]

$$\Gamma(V) = \Gamma_0 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{\ln \left( \frac{V_0}{V} \right)}.$$

По экспериментальным данным [28, 29] в данной работе определены коэффициенты уравнения состояния LiF.

На рис. 4 представлена ударная адиабата LiF в координатах  $(P-V)$  и  $(D-u)$ .

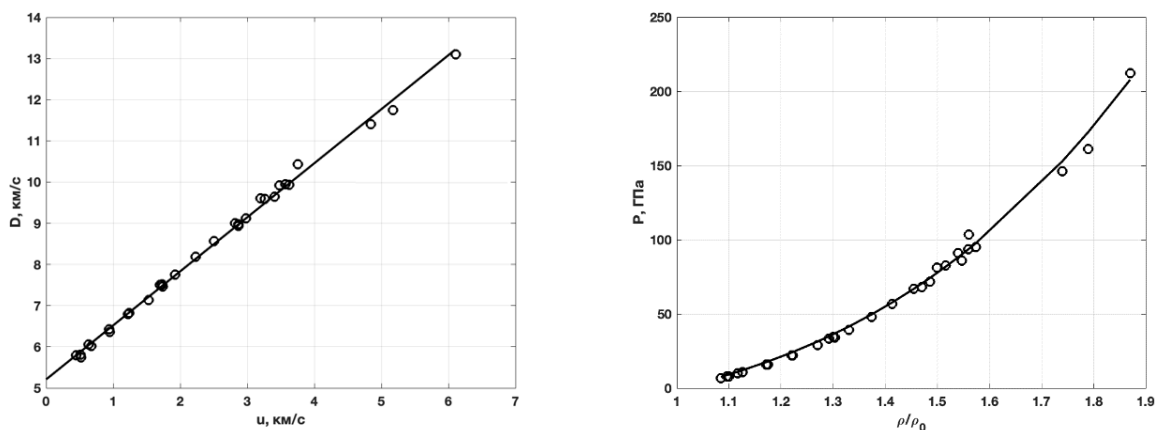


Рис. 4. Ударная адиабата фторида лития. Сплошные линии – расчет по уравнению состояния, построенному в данной работе, точки – эксперимент [28, 29]

Верификация УРС LiF проводилась по экспериментальным данным [13], в которых моделируется удар медного диска по составному диску из LiF. Схема эксперимента представлена на рис. 5. Радиус дисков составляет 30 мм, что при проведении эксперимента исключает влияние боковой разгрузки и позволяет проводить численное моделирование в одномерной постановке. В эксперименте регистрировалась массовая скорость на контактной границе «ударник–образец 1» и на границе «образец 1 – образец 2». Результаты численного моделирования представлены на рис. 6. Для корректировки кажущейся скорости из экспериментов используется выражение (4). Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало, что построенное УРС LiF

(12) дает правильное описание как ударного сжатия, так и последующей разгрузки в рассматриваемом материале.

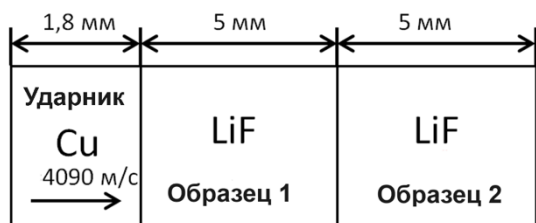


Рис. 5. Схема эксперимента

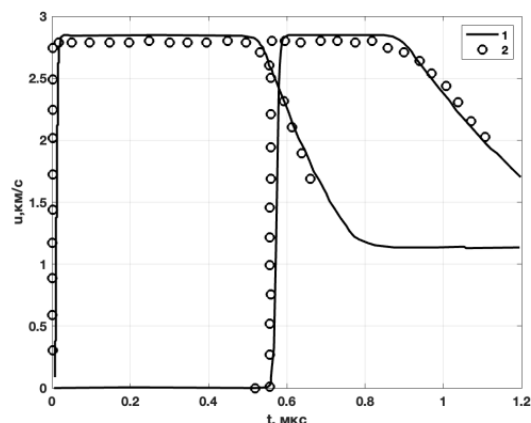


Рис. 6. Профили массовых скоростей: 1 – математическое моделирование, 2 – экспериментальные данные [13]

### 3. Эксперимент и математическое моделирование. Результаты

Схема эксперимента приведена на рис. 1. Ударник из нержавеющей стали 12Х18Н10Т разогнанялся продуктами взрыва заряда взрывчатого вещества через воздушный зазор. Толщина ударника выбиралась таким образом, чтобы фронт ударной волны, распространяющийся по образцу после соударения ударника с образцом, достигал свободной поверхности образца раньше, чем волна разрежения от задней поверхности ударника. Постановка экспериментов описана в таблице.

Постановка экспериментов

| Материал ударника      | Нержавеющая сталь 12Х18Н10Т |      |      |      |
|------------------------|-----------------------------|------|------|------|
| Опыт №                 | 1                           | 2    | 3    | 4    |
| Толщина ударника, мм   | 4,5                         | 2,5  | 2    | 1,6  |
| Скорость ударника, м/с | 530                         | 1265 | 1930 | 5200 |
| Материал образца       | LiF                         |      |      |      |
| Толщина образца, мм    | 20                          |      |      |      |

Далее проведено математическое моделирование этих опытов. С использованием формул (4) и (6), найдены временные зависимости кажущейся скорости контактной границы. Дополнительно были получены профили видимой массовой скорости из данных расчётов по формуле (10). Интеграл, входящий в (9), вычислялся методом трапеций. Для вычисления видимой массовой скорости для каждого момента времени использованы значения оптического пути с текущего и предыдущего временного слоя. Сравнение экспериментальных и расчётных данных показано на рис. 7.

Из полученных зависимостей видно, что рассчитанная видимая скорость согласуется с данными, полученными экспериментально, что подтверждает адекватность математической модели и выбранного значения поправочного коэффициента. Расхождения с экспериментальными данными в конце записи могут быть обусловлены приходом боковой волны разгрузки в окне.

Кроме того, значения видимой скорости, полученные двумя способами, отличаются. Поэтому были построены зависимости изменения поправочного коэффициента от времени регистрации для каждой постановки. Поправочные коэффициенты рассчитаны как отношение видимой (расчет по (10)) и истинной (получена напрямую из математического моделирования) массовых скоростей для каждого момента времени регистрации.

Для примера зависимость поправочного коэффициента от времени в постановке, соответствующей опыту № 3, представлена на рис. 8.

Во время прихода волны разрежения на контактную границу «образец–окно» наблюдается изменение поправочного коэффициента. Это может быть связано с тем, что зависимость показателя преломления от плотности при ударном сжатии и разгрузке имеет различный характер. Поэтому при интерпретации экспериментальных данных необходимо дополнительно вводить поправку на изменение оптического пути за волной разрежения. Тем не менее при давлениях  $5\div 90$  ГПа, полученных в опытах № 1–4, изменение поправочного коэффициента не превышает 1 %, что делает фторид лития очень удобным оконным материалом для экспериментов с нестационарными газодинамическими течениями.

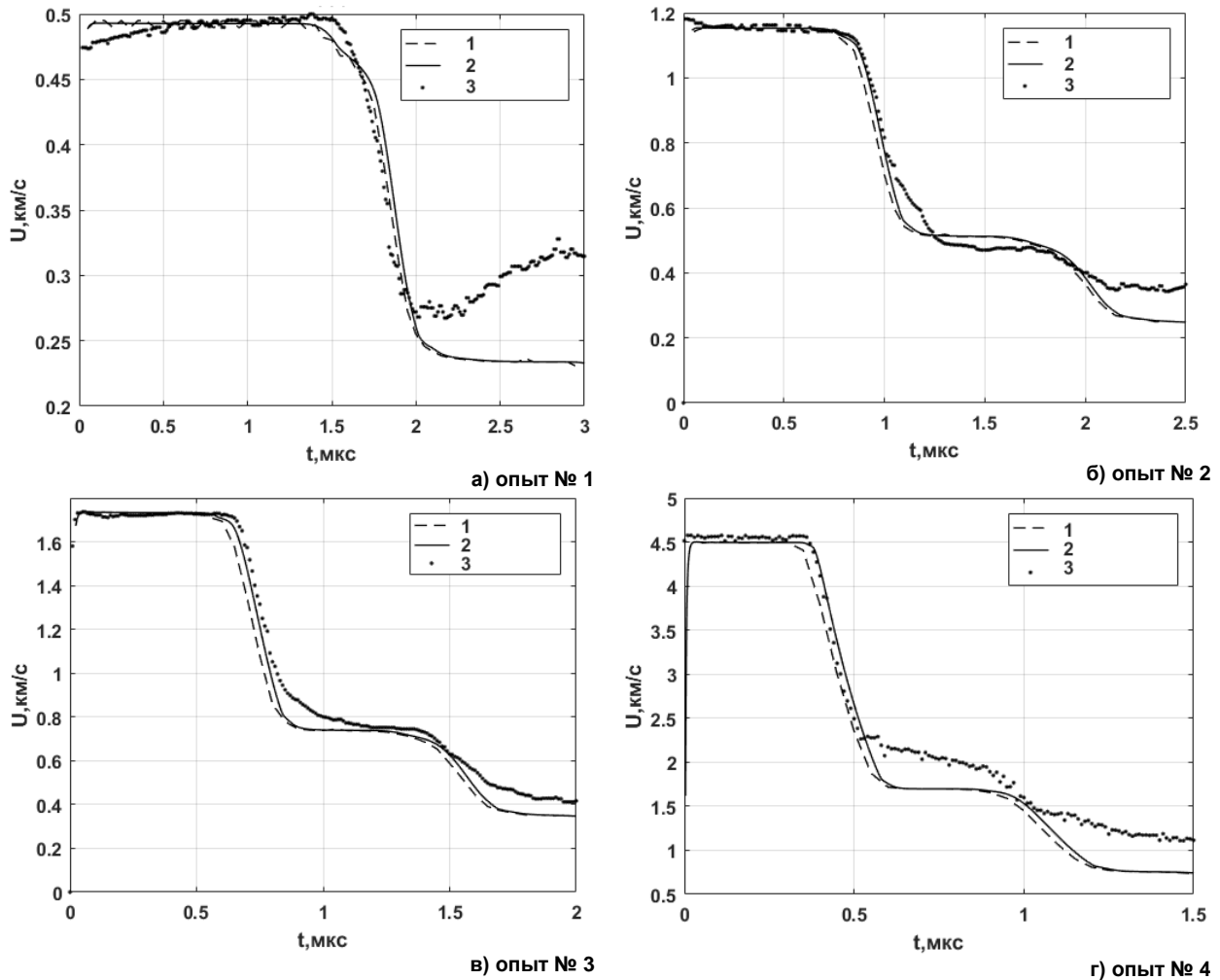


Рис. 7. Сравнение экспериментальных и расчетных профилей скорости:  
1 – расчет по формуле (9), 2 – расчет по формуле (4), 3 – экспериментальные данные

Кроме того, было исследовано влияние изоэнтропической разгрузки на изменение оптического пути. Так, для опыта № 4 на момент времени  $t = 0,6$  мкс были рассчитаны распределения плотности  $\rho_{\text{№4}}(x)$  и показателя преломления  $n_{\text{№4}}(x)$  (рис. 9 а, б, сплошная линия), а также соответствующий им оптический путь  $Z_{\text{№4}}$ , который был вычислен по формуле

$$Z(t) = \int_0^{x'} (1,2758 + 3,99 \cdot 10^{-2} \cdot \rho(x,t)) dx,$$

где  $x'$  – толщина вещества окна на пути лазерного луча.

Из рис. 9 а, б видно, что левая граница образца претерпела изоэнтропическую разгрузку. Также были получены профили  $\rho_{\text{модель}}(x)$  и  $n_{\text{модель}}(x)$  на этот же момент времени в модельной задаче с ударником бесконечной толщины, имеющим ту же скорость движения. В этом случае давление на границе, реализованное после ударного нагружения, сохранилось (рис. 9 а, б, пунктирная линия). По полученным профилям был определен соответствующий оптический путь

$Z_{\text{модель}}$ , а затем взята разность  $\delta Z = Z_{\text{модель}} - Z_{\text{№4}}$ , которая показывает, насколько уменьшился оптический путь (рис. 9, в).

Для данного опыта изменение оптического пути составило  $\delta Z = 0,045$  мм. Это соответствует изменению массовой скорости  $\delta U = \delta Z / t = 75$  м/с. Таким образом, изменение поправочного коэффициента  $\delta a = \delta U / U = 0,0167$ . Здесь  $U$  – массовая скорость за фронтом ударной волны.

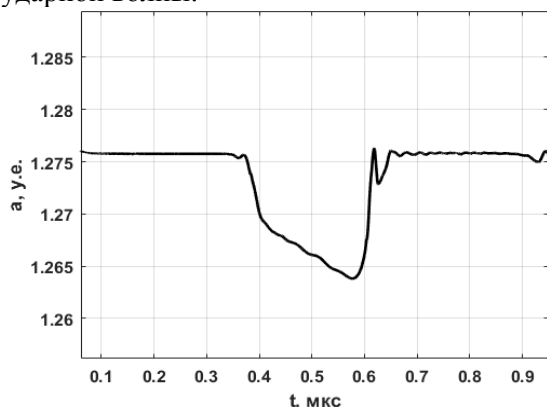


Рис. 8. Поправочный коэффициент, опыт № 4

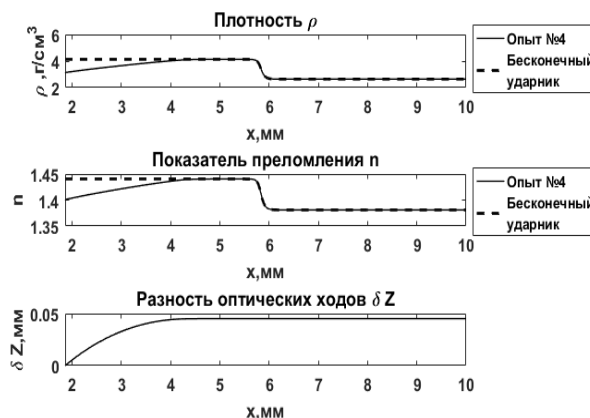


Рис. 9. Распределения по длине образца: а) плотности, б) показателя преломления, в) разность оптического пути

Видно, что изоэнтропическая разгрузка уменьшает оптический путь луча, что приводит к уменьшению поправочного коэффициента, т. е. к нелинейности зависимости  $u_{\text{app}}(u_{\text{true}})$ , в отличие от работы [3], где также проведен анализ зависимости поправочного коэффициента при ударном нагружении и изоэнтропической разгрузке и авторы делают выводы, что при нагружении до 17 ГПа зависимость линейна.

## Заключение

На основе уравнений механики сплошных сред и уравнения состояния в форме Ми–Грюнайзена разработана математическая модель, описывающая проведение кристаллов фторида лития при их ударно-волновом нагружении и изоэнтропической разгрузке.

Расчетные профили были сопоставлены с экспериментальными данными, полученными с помощью методики PDV с учётом уточненного поправочного коэффициента, вычисленного с использованием формулы для оптического пути в сжатом кристалле. Для фторида лития при ударном сжатии коэффициент составил  $a = 1,275$ . При изоэнтропической разгрузке поправочный коэффициент принимает значение  $a = 1,265$ . Таким образом, результаты математического моделирования показали, что требуется дополнительная обработка и анализ экспериментальных данных.

Разработанная математическая модель и полученные результаты могут быть использованы для прогнозирования поведения кристаллов фторида лития при различных динамических нагрузках, а также может быть апробирована на других оконных материалах, используемых в гидродинамических экспериментах.

## Литература

1. Методы исследования свойств материалов при интенсивных динамических нагрузках: монография / Под общ. ред. М.В. Жерноклетова. – 2-е изд., доп. и испр. – Саров: ФГУП «РФЯЦ–ВНИИЭФ», 2005. – 428 с.
2. Экспериментальные методы и средства в физике экстремальных состояний вещества: монография / Под ред. Р.И. Ильяева, А.Л. Михайлова, М.В. Жерноклетова. – М.: РАН, 2021. – 484 с.
3. Velocity Correction and Refractive Index Changes for [100] Lithium Fluoride Optical Windows under Shock Compression, Recompression, and Unloading / B.M. LaLone, O.V. Fat'yanov, J.R. Asay, Y.M. Gupta // J. Appl. Phys. – 2008. – Vol. 103, no. 9. – P. 093505.
4. Wise, L.C. Laser Interferometer Measurements of Refractive Index in Shock-Compressed Materials / L.J. Wise, L.C. Chhabildas // Shock Waves in Condensed Matter, Plenum. – 1986. – P. 441.

5. Determining the Refractive Index of Shocked [100] Lithium Fluoride to the Limit of Transmissibility / P.A. Rigg, M.D. Knudson, R.J. Scharff, R.S. Hixson // *J. Appl. Phys.* – 2014. – Vol. 116. – P. 033515.
6. Кормер, С.Б. Оптические исследования свойств ударно сжатых конденсированных диэлектриков / С.Б. Кормер // *Успехи физических наук.* – 1968. – Т. 94, № 4. – С. 641–683.
7. Smirnov, N.A. *Ab initio* Calculations of the Thermodynamic Properties of LiF Crystal / N.A. Smirnov // *Physical Review.* – 2011. – Vol. 83. – P. 014109
8. Sun, Z. First-Principles Calculations of the Structural, Electronic, and Optical Properties of LiF up to 300 GPa / Z. Sun, J. Dong, Y. Xia // *Physica B.* – 2011. – Vol. 406 – P. 3660–3665.
9. Effects of the Vacancy Point-Defect on the Refractive Index and Equation of State (EOS) of LiF at High Pressure: A First Principles Investigation / L. He, M.J. Tang, J. Yin *et al.* // *Physica B.* – 2012. – Vol. 407. – P. 694–697.
10. High-Pressure and High-Temperature Physical Properties of LiF Studied by Density Functional Theory Calculations and Molecular Dynamics Simulations / X.-W. Sun, Z.-J. Liu, W.-L. Quan *et al.* // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* – 2018. – Vol. 116. – P. 209–215.
11. Wang, J. Structural, Elastic, Electronic and Optical Properties of Lithium Halides (LiF, LiCl, LiBr, and LiI): First-Principal Calculations / J. Wang, M. Deng, Y. Chen *et al.* // *Materials Chemistry and Physics.* – 2020. – Vol. 244. – P. 122733.
12. Hayes, D. Unsteady Compression Waves in Interferometer Windows/ D. Hayes // *J. Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 89. – P. 6484.
13. Sound Velocity, Equation of State, Temperature and Melting of LiF Single Crystals under Shock Compression / Q. Liu, X. Zhou, X. Zeng, S. N. Luo // *Journal of Applied Physics.* – 2015. – Vol. 117. – P. 045901.
14. Mechanical and Optical Response of [100] Lithium Fluoride to Multi-Megabar Dynamic Pressures / J. Davis, M. Knudson, L. Shulenburg, S. Crockett // *J. Appl. Phys.* – 2016. – Vol. 120. – P. 165901.
15. Refractive Index of [100] Lithium Fluoride under Shock Pressures up to 151 GPa / G. Young, X. Liu, C. Leng *et al.* // *AIP Advances.* – 2018. – Vol. 8. – P. 125310.
16. Furnish, M.D. Time-Resolved Particle Velocity Measurements at Impact Velocities of 10 km/s / M.D. Furnish, L.C. Chhabildas, W.D. Reinhart // *International Journal of Impact Engineering.* – 1999. – Vol. 23. – P. 261–270.
17. Sun, Z. First-Principles Calculations of the Structural, Electronic, and Optical Properties of LiF up to 300 GPa / Z. Sun, J. Dong, Y. Xia // *Physica B.* – 2011. – Vol. 406. – P. 3660–3665.
18. Refractive Index of Lithium Fluoride Ramp Compressed to 800 GPa / D.E. Fratanduono, T.R. Boehly, M.A. Barrios *et al.* // *J. Appl. Phys.* – 2011. – Vol. 109. – P. 123521.
19. Kirsch, L.E. Refractive Index of Lithium Fluoride to 900 Gigapascal and Implications for Dynamic Equation of State Measurements / L.E. Kirsch, S.J. Ali, D.E. Fratanduono *et al.* // *J. Appl. Phys.* – 2019. – Vol. 125. – P. 175901.
20. Jones, S.C. Refractive Index and Elastic Properties of Z-Cut Quartz Shocked to 60 kbar / S.C. Jones, Y. M. Gupta // *Journal of Applied Physics.* – 2000. – Vol. 88. – P. 5671.
21. Accuracy Limits and Window Corrections for Photon Doppler Velocimetry/ B.J. Jensen, D.B. Holtkamp, P.A. Rigg, D.H. Dolan // *Journal of Applied physics.* – 2007. – Vol. 101, no. 1. – P. 013523.
22. Refractive Index of LiF Single Crystal at High Pressure and Its Window Correction / W.G. Zhao, X. Zhou, J.B. Li, X.L. Zeng // *Chinese Journal of High Pressure Physics.* – 2014. – Vol. 28. – P. 571–576.
23. Яловец, А.П. Расчет течений среды при воздействии интенсивных потоков заряженных частиц / А.П. Яловец // *Прикладная механика и техническая физика.* – 1997. – Т. 38, № 1. – С. 151–166.
24. Klinacheva, N.L. Modelling of Shock Wave Experiments on Two-Fold Compression of Polymethyl Methacrylate / N.L. Klinacheva, E.S. Shestakovskaya, A.P. Yalovets // *Journal of Computational and Engineering Mathematics.* – 2022. – Vol. 9, № 2. – P. 26–38.
25. Prandtl, L. Spannungsverteilung in Plastischen Korper / L. Prandtl // *Proc. 1st Int. Congr. Appl. Mech. Delft.* – 1924. – P. 43.



26. Рейс, А. Учет упругой деформации в теории пластичности. Теория пластичности / А. Рейс. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1948. – С. 206–222.
27. Бельхеева, Р.К. Модель коэффициента Грюнайзена для широкого диапазона плотностей на примере меди / Р.К. Бельхеева // Теплофизика высоких температур. – 2021. – Т. 59, № 4. – С. 514–519.
28. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ: Научное издание / под ред. Р.Ф. Трунина – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2006. – 531 с.
29. Marsh, S.P. LASL Shock Hugoniot Data / S.P. Marsh. – University of California Press, 1980. – 658 p.

*Поступила в редакцию 1 октября 2024 г.*

### Сведения об авторах

Красильников Александр Владимирович – сотрудник ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Российская Федерация.

Несмиянов Елисей Игоревич – магистрант, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; сотрудник ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Российская Федерация.

Шестаковская Елена Сергеевна – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой вычислительной механики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: shestakovskaiaes@susu.ru

Попцов Александр Германович – сотрудник ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Российская Федерация.

Ковалев Антон Евгеньевич – сотрудник ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Российская Федерация.

Яловец Александр Павлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительной механики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2024, vol. 16, no. 4, pp. 96–106*

---

DOI: 10.14529/mmph240411

## STUDYING THE CORRECTION FACTOR OF A LITHIUM FLUORIDE CRYSTAL DURING ITS SHOCK COMPRESSION AND ISOENTROPIC UNLOADING

*A.V. Krasilnikov<sup>1</sup>, E.I. Nesmiyanov<sup>1,2</sup>, E.S. Shestakovskaya<sup>2</sup>, A.G. Poptsov<sup>1</sup>, A.E. Kovalev<sup>1</sup>, A.P. Yalovets<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> All-Russian Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russia

<sup>2</sup> South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

Abstract. Lithium fluoride (LiF) single crystals are widely used in experiments involving intense dynamic loading as a window for optical methods, such as VISAR or PDV. They are transparent and do not undergo phase transitions under shock compression up to ~200 GPa. To interpret experimental data obtained using such a window, it is necessary to introduce a correction coefficient. This coefficient links the apparent mass velocity obtained experimentally to the true mass velocity. While this coefficient is constant for stationary shock waves, it is affected by the spatial non-uniformity of the window's density for more complex flows. The study highlights the experimental investigations of shock-wave processes in lithium fluoride conducted under shock loading up to 90 GPa. Mathematical modeling of the experiments was also performed. For this purpose, the authors built a mathematical model of one-dimensional elastoplastic flows of the medium using the Prandtl–Reuss plasticity model, and constructed the equation of state for lithium fluoride. The correction coefficient was obtained in two ways: based on the dependence of the refractive index on density and the law of mass conservation on the shock wave, and

based on the dependence of the optical path length of the laser beam on the density distribution in the material under study.

*Keywords:* mathematical modeling; refractive index; lithium fluoride; experimental studies; laser techniques.

### References

1. *Metody issledovaniya svojstv materialov pri intensivnyh dinamicheskikh nagruzkah: Monografiya* (Methods for Studying the Properties of Materials under Intense Dynamic Loads: Monograph) / Under the General Editorship of M.V. Zhernokletov, 2nd ed., add. and corr., Sarov: FSUE "RFNC-VNIIEF", 2005, P. 428. (in Russ.)
2. Ilkaev R.I., Mikhailov A.L., Zhernokletov M.V. (Eds.) *Eksperimental'nye metody i sredstva v fizike ekstremal'nyh sostoyanij veshchestva: Monografiya* (Experimental Methods and Means in the Physics of Extreme States of Matter: Monograph). Moscow, RAS, 2021, 484 p. (in Russ.)
3. LaLone B.M., Fat'yanov O.V., Asay J.R., Gupta Y.M. Velocity Correction and Refractive Index Changes for [100] Lithium Fluoride Optical Windows under Shock Compression, Recompression, and Unloading. *J. Appl. Phys.*, 2008, Vol. 103, no. 9, p. 093505. DOI:10.1063/1.2912500
4. Wise L.J., Chhabildas L.C. Laser Interferometer Measurements of Refractive Index in Shock-Compressed Materials. *Shock Waves in Condensed Matter, Plenum*, 1986, 441 p.
5. Rigg P.A., Knudson M.D., Scharff R.J., Hixson R.S. Determining the Refractive Index of Shocked [100] Lithium Fluoride to the Limit of Transmissibility. *J. Appl. Phys.*, 2014, Vol. 116, P. 033515. DOI:10.1063/1.4890714
6. Kormer, S.B. Optical Study of the Characteristics of Shock-Compressed Condensed Dielectrics. *Phys. Usp.*, 1968, Vol. 11, no. 2, pp. 229–254.
7. Smirnov N.A. *Ab initio* Calculations of the Thermodynamic Properties of LiF Crystal. *Physical Review*, 2011, Vol. 83, P. 014109 DOI: 10.1103/PhysRevB.83.014109
8. Sun Z., Dong J., Xia Y. First-Principles Calculations of the Structural, Electronic, and Optical Properties of LiF up to 300 GPa. *Physica B.*, 2011, Vol. 406, P. 3660–3665. DOI:10.1016/j.physb.2011.06.066
9. He L., Tang M.J., Yin J., Zhou X.M., Zhu W.J., Liu F.S., He D.W. Effects of the Vacancy Point-Defect on the Refractive Index and Equation of State (EOS) of LiF at High Pressure: A First Principles Investigation. *Physica B*, 2012, Vol. 407, pp. 694–697. DOI:10.1016/j.physb.2011.11.060
10. Sun X.-W., Liu Z.-J., Quan W.-L., Song T., Khenata R., Omran S.B. High-Pressure and High-Temperature Physical Properties of LiF Studied by Density Functional Theory Calculations and Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2018, Vol. 116, pp. 209–215. DOI:10.1016/j.jpcs.2018.01.037
11. Wang J., Deng M., Chen Y., Liu X., Ke W., Li D., Dai W., He K. Structural, Elastic, Electronic and Optical Properties of Lithium Halides (LiF, LiCl, LiBr, and LiI): First-Principal Calculations. *Materials Chemistry and Physics*, 2020, Vol. 244, P. 122733. DOI:10.1016/j.matchemphys.2020.122733
12. Hayes D. Unsteady Compression Waves in Interferometer Windows. *J. Appl. Phys.*, 2001, Vol. 89, P. 6484.
13. Liu Q., Zhou X., Zeng X., Luo S.N. Sound Velocity, Equation of State, Temperature and Melting of LiF Single Crystals under Shock Compression. *J. Appl. Phys.*, 2015, Vol. 117, P. 045901. DOI: 10.1063/1.4906558
14. Davis J., Knudson M., Shulenburg L., Crockett S. Mechanical and Optical Response of [100] Lithium Fluoride to Multi-Megabar Dynamic Pressures. *J. Appl. Phys.*, 2016, Vol. 120, P. 165901. DOI:10.1063/1.4965869
15. Young G., Liu X., Leng C., Yang J., Huang H. Refractive Index of [100] Lithium Fluoride under Shock Pressures up to 151 GPa. *AIP Advances*, 2018, Vol. 8, P. 125310. DOI:10.1063/1.5065543
16. Furnish M.D., Chhabildas L.C., Reinhart W.D. Time-Resolved Particle Velocity Measurements at Impact Velocities of 10 km/s. *International Journal of Impact Engineering*, 1999, Vol. 23, pp. 261–270.
17. Sun Z., Dong J., Xia Y. First-Principles Calculations of the Structural, Electronic, and Optical Properties of LiF up to 300 GPa. *Physica B*, 2011, Vol. 406, P. 3660–3665. DOI: 10.1016/j.physb.2011.06.066

18. Fratanduono D.E., Boehly T.R., Barrios M.A., Meyerhofer D.D., Eggert J.H., Smith R.F., Hicks D.G., Celliers P.M., Braun D.G., Collins G.W. Refractive Index of Lithium Fluoride Ramp Compressed to 800 GPa. *J. Appl. Phys.*, 2011, Vol. 109, P. 123521. DOI:10.1063/1.3599884
19. Kirsch L.E., Ali S.J., Fratanduono D.E., Kraus R.G., Braun D.G., Fernandez-Panella A., Smith R.F., McNaney J.M., Eggert J.H. Refractive Index of Lithium Fluoride to 900 Gigapascal and Implications for Dynamic Equation of State Measurements. *J. Appl. Phys.*, 2019, Vol. 125, P. 175901. DOI:10.1063/1.5091722
20. Jones S.C., Gupta Y.M. Refractive Index and Elastic Properties of Z-Cut Quartz Shocked to 60 KBar. *J. Appl. Phys.*, 2000, Vol. 88, P. 5671. DOI:10.1063/1.1319329
21. Jensen, B.J., Holtkamp D.B., Rigg P.A., Dolan D.H. Accuracy Limits and Window Corrections for Photon Doppler Velocimetry. *J. Appl. Phys.*, 2007, Vol. 101, no. 1, P. 013523. DOI: 10.1063/1.2407290
22. Zhao W.G., Zhou X., Li J.B., Zeng X.L. Refractive Index of LiF Single Crystal at High Pressure and its Window Correction. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2014, Vol. 28, pp. 571–576. DOI: 10.11858/gywlxb.2014.05.010
23. Yalovetz A.P. Calculation of Flows of a Medium Induced by High-Power Beams of Charged Particles. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 1997. Vol. 38, no. 1, pp. 137–150.
24. Klinacheva N.L., Shestakovskaya E.S., Yalovets A.P. Modeling of Shock Wave Experiments on Two-Fold Compression of Polymethyl Methacrylate. *Journal of Computational and Engineering Mathematics*, 2022, Vol. 9, no. 2, pp. 26–38. DOI: 10.14529/jcem220203
25. Prandtl L. Spannungsverteilung in Plastischen Korper. *Proc. 1st Int. Congr. Appl. Mech. Delft.*, 1924, P. 43.
26. Rejs A. Uchet uprugoj deformacii v teorii plastichnosti. *Teoriya plastichnosti* (Accounting for Elastic Deformation in the Theory of Plasticity. Theory of Plasticity). Moscow, Publishing house of foreign literature, 1948, pp. 206–222. (in Russ.)
27. Belkheeva R.K. Model of the Grüneisen Coefficient for a Wide Range of Densities on the Example of Copper. *High Temperature*, 2022, Vol. 60, Suppl. 1, pp. 26–31.
28. Trunin R.F. (Ed) *Eksperimental'nye dannye po udarno-volnovomu szhatiyu i adiabaticheskomu rasshireniyu kondensirovannyh veshchestv: Nauchnoe izdanie* (Experimental Data on Shock-Wave Compression and Adiabatic Expansion of Condensed Matter: Scientific Publication). Sarov: FSUE “RFNC–VNIIEF”, 2006, 531 p. (in Russ.)
29. Marsh S.P. *LASL Shock Hugoniot Data*. University of California Press, 1980, 658 p.

*Received October 1, 2024*

### Information about the authors

Krasil'nikov Aleksandr Vladimirovich is employee of All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

Nesmiyanov Elisey Igorevich is Master Student, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; employee of All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

Shestakovskaya Elena Sergeevna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of the Department of Computational Mechanics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russia. e-mail: shestakovskaiaes@susu.ru

Poptsov Aleksandr Germanovich is employee of All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

Kovalev Anton Evgen'evich is employee of All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

Yalovets Aleksandr Pavlovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Computational Mechanics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.