

Научная статья

УДК 539.89

doi: 10.17223/19988621/79/10

Силикаты магния при высоких динамических нагрузках

Константин Константинович Маевский

*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН,
Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия,
konstantinm@hydro.nsc.ru*

Аннотация. Представлены результаты численных экспериментов по моделированию высокоэнергетического воздействия на силикаты магния на примере энстатита $Mg_2[Si_2O_6]$ и форстерита Mg_2SiO_4 , рассматриваемых как смесь кварца SiO_2 и периклаза MgO . Авторская модель предполагает, что все компоненты, составляющие исследуемый материал, в том числе и газ в порах, при ударно-волновом воздействии имеют равные значения давления и температуры (термодинамическое равновесие). Исследуемый образец в области фазового перехода описывается как смесь фазы низкого давления и фазы высокого давления. Такой подход рассматриваемой модели позволяет рассчитывать термодинамические параметры в области полиморфных фазовых переходов. При расчетах учитывается фазовый переход кварца и периклаза. Результаты верифицированы по экспериментальным данным, полученным в динамических экспериментах.

Ключевые слова: уравнение состояния вещества, фазовый переход, силикаты магния, кварц, периклаз

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Бюджетного проекта III.22.3.1.

Для цитирования: Маевский К.К. Силикаты магния при высоких динамических нагрузках // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2022. № 79. С. 111–119. doi: 10.17223/19988621/79/10

Original article

Magnesium silicates at high dynamic loading

Konstantin K. Maevskiy

*Lavrentyev Institute of Hydrodynamics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation,
konstantinm@hydro.nsc.ru*

Abstract. Research on the dynamic compression of geological materials is important for understanding composition and physical condition of the deep interior of the Earth and other planets. It also provides some data on the interaction processes related to the formation and evolution of planets. Magnesium silicates dominate in Earth's mantle and, thus, are expected to become the major phases in rocky exoplanets. In particular, enstatite

$\text{Mg}_2[\text{Si}_2\text{O}_6]$ and forsterite Mg_2SiO_4 are essential constituents of Earth's mantles. Strong emphasis is put on the phase transition possibility for magnesium silicates under study. A remarkable fact is the dissociation of Mg_2SiO_4 into the following oxides: MgO and SiO_2 (stishovite). The experiments have been carried out at a pressure value of 33 GPa, which corresponds to that in Earth's mantle at a depth of 1000 km.

In this paper, the results of modeling the shock-wave loading of enstatite and forsterite as the mixtures of quartz SiO_2 and periclase MgO are presented. The proposed model assumes that the components of the mixture under shock-wave loading are in thermodynamic equilibrium. The components of the material under study are considered in a phase transition region as a mixture of low- and high-pressure phases. The model is also valid for a polymorphic phase transition region. The calculations of magnesium silicates are performed with account for the polymorphic phase transition of quartz and periclase. The results are validated using the data obtained in dynamic experiments.

Keywords: equation of state, phase transition, magnesium silicates, quartz, periclase

Acknowledgments: This work is partially supported by the State Assignment of LII SB RAS (project III.22.3.1).

For citation: Maevskiy, K.K. (2022) Magnesium silicates at high dynamic loading. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 79. pp. 111–119. doi: 10.17223/19988621/79/10

Введение

Исследования по динамическому сжатию геологических материалов важны для понимания состава и физического состояния глубинных недр Земли и других планет. Растет интерес к применению экспериментальных исследований геологических материалов в условиях сверхвысоких значений давления и температуры для решения многих задач науки о Земле и планетах. Эти работы также дают представление о процессах воздействия, имеющих отношение к формированию и эволюции планет. Повышается внимание к применению экспериментальных исследований геологических материалов в условиях сверхвысокого давления и температуры как к новым, так и к давним вопросам науки о Земле и планетах [1, 2]. Силикаты магния доминируют в мантии Земли и, как ожидается, станут основными фазами в скалистых экзопланетах [3]. Энстатит $\text{Mg}_2[\text{Si}_2\text{O}_6]$ и форстерит Mg_2SiO_4 являются одними из важнейших компонентов мантии Земли. Традиционные исследования этих материалов с использованием ударного волнового сжатия обобщены в [4].

Большое внимание уделяется возможности фазового перехода исследуемых силикатов магния. Это связано с тем, что силикаты, как и многие другие материалы, в случае приложения высокого давления испытывают фазовые превращения. Было отмечено, что наблюдалась диссоциация Mg_2SiO_4 в окислы MgO и SiO_2 (стишовит). Данные эксперименты проводились при значении давления 33 ГПа, что соответствует давлению в мантии Земли на глубине 1 000 км [5].

Термодинамически равновесная модель [6] позволяет рассчитывать параметры исследуемых образцов – давление, сжатие, температуру, и в области полиморфных фазовых переходов. Таким образом, появляется возможность оценить вклад фазовых переходов в изменение значения плотности слоев мантии Земли, что позволит точнее определять состав и термодинамические параметры мантии (давление и температуру). Цель данной работы заключается в описании результа-

тов ударно-волновых экспериментов силикатов магния для определения достоверности результатов моделирования по авторской методике.

В настоящей работе моделируется поведение энстатита и форстерита, которые рассматриваются как смесь кварца и периклаза. Чтобы получить представление о том, как изменяются значения давления и температуры исследуемых образцов в области фазовых переходов, при расчетах учитываются фазовые переходы компонентов.

Методика расчета

Моделирование ударно-волнового нагружения энстатита и форстерита как смесей кварца SiO_2 и периклаза MgO выполняется по модели, предполагающей, что для всех компонентов исследуемого материала выполняется равенство значений давления и температуры при ударно-волновом нагружении, что означает термодинамическое равновесие составляющих смеси [6]. Для расчета поведения твердых фаз применяется уравнение состояния (УРС) Ми–Грюнайзена

$$P(\rho, T) = P_C(\rho) + P_T(T), \quad (1)$$

$$P_T(\rho, T) = \Gamma \rho E_T(T), \quad (2)$$

$$E_T(T) = c_v(T - T_0). \quad (3)$$

Здесь P_C – потенциальный, а P_T – тепловой компонент давления; E_T – тепловая составляющая удельной энергии; c_v – теплоемкость; температура $T_0 = 300$ К, что соответствует начальным условиям. Для газа используется УРС идеального газа. Условия сохранения выписываются для массы каждого компонента, а для импульса и энергии – для смеси в целом на фронте волны в виде соотношений Рэнкина–Гюгонно [7]:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{D}{D - U}, \quad (4)$$

$$P = \rho_0 U D, \quad (5)$$

$$E = \frac{1}{2} P \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \quad (6)$$

где ρ – текущая, а ρ_0 – начальная плотность твердого компонента, U – массовая скорость, D – волновая скорость. Авторская модель работает при значениях давления более 3 ГПа. С учетом этого диапазона давления значением начальной энергии, как и значением давления при нормальных условиях, пренебрегаем. Подход, при котором для потока массы законы сохранения рассматриваются для каждого компонента отдельно, позволяет не только моделировать сжатие исследуемого образца в целом, но также рассчитывать сжатия каждого компонента. Для образца, который состоит из n твердых компонентов, имеющих начальные объемные доли μ_{i0} , получена следующая зависимость давления от сжатия компонентов:

$$P = \frac{\sum_{i=1}^n A_i \frac{\mu_{i0}}{\sigma_i} \left[\left(h_i - \frac{k_i + 1}{k_i - 1} \right) \sigma_i^{k_i} + \frac{2k_i \sigma_i}{k_i - 1} - h_i - 1 \right]}{\sum_{i=1}^n \frac{\mu_{i0}}{\sigma_i} h_i + \left(\frac{h_g}{\sigma_g} \right) \left(1 - \sum_{i=1}^n \mu_{i0} \right) - 1}. \quad (7)$$

При этом $h_i = 2/\Gamma_i + 1$; $h_g = 2/(\gamma - 1) + 1$; $\sigma_i = \rho_i/\rho_{i0}$ – степени сжатия твердых компонентов с индексом $i = 1, \dots, n$, $\sigma_g = \rho_g/\rho_{g0}$ – степень сжатия газа; ρ_g, ρ_{g0} – текущая и начальная плотности для газа в порах. Показатель адиабаты газа $\gamma = 1.41$. A, k – коэффициенты в соответствующих УРС. Зависимость $\Gamma = P_T V/E_T$ выражает влияние тепловых компонент [8]. Выписывая условия равенства для значений температур компонент, а также УРС для каждого компонента, вместе с (7) можно построить ударные адиабаты исследуемого материала.

При описании фазового перехода (ФП) используется следующий подход: материал в данной области моделируется как смесь фаз низкого и высокого давления. При таком подходе используемая модель позволяет достоверно описывать область полиморфного ФП. При моделировании в области ФП объемные доли фаз определяются следующим образом: фаза высокого давления образуется из фазы низкого давления, объем которой определяется как α . По данным экспериментов определяется значение давления, соответствующее началу процесса ФП. Зависимость доли α от приращения внутренней энергии близка к линейной: $\alpha = \Delta E/kf$, при этом используются коэффициент $kf = E_f - E_b$ и разница значений энергии $\Delta E = E - E_b$. Здесь вводятся обозначения: E – текущая внутренняя энергия, E_b – энергия в начале ФП, E_f – внутренняя энергия в конце ФП, когда весь материал трансформировался в фазу высокого давления. Параметр kf позволяет описать данные экспериментов для исследуемых образцов, имеющих различные значения пористости [9]. При расчетах ударной адиабаты для материалов, испытывающих полиморфный фазовый переход, задается три участка в зависимости от значения α :

$$\begin{cases} E \leq E_b & \alpha = 0, \\ E_b \leq E \leq E_f & \alpha = \Delta E / kf, \\ E \geq E_f & \alpha = 1, \end{cases} \quad (8)$$

При расчетах поведения энстатита и форстерита учитывается полиморфный фазовый переход кварца и периклаза. Для SiO_2 и MgO определены следующие значения: параметр kf равен 2.5 и 15.0 кДж/г, давление начала фазового перехода 11 и 250 ГПа соответственно.

Результаты верифицированы по экспериментальным данным, полученным в динамических экспериментах. Параметры модели, которые использовались в расчетах для оксидов SiO_2 и MgO , отражены в таблице. Фаза низкого давления обозначена a , фаза высокого давления – b .

Фазовый состав размариваемых образцов

Параметр	MgO (a)	MgO (b)	SiO ₂ (a)	SiO ₂ (b)
A, ГПа	39.62	40.0	14.5	130
ρ , г/см ³	3.584	4.050	2.204	4.310
n	4	3.99	4.05	3.00
c_v , Дж/кг·К	937.2	937.2	1 100	1 100

Результаты моделирования

Исходя из предположения о возможной диссоциации силикатов магния под давлением, выполнены расчеты для энстатита и форстерита как смеси оксидов SiO_2 и MgO . Стехиометрические соотношения исследуемых образцов определяют объемные доли данных оксидов как 1:1 для энстатита и 1:2 для форстерита. Ре-

зультаты моделирования для энстатита $\rho_0 = 3.01 \text{ г/см}^3$ представлены на рис. 1. Здесь же показаны данные двух групп экспериментов [10] с образцами, имеющими среднюю плотность 3.01 и 2.95 г/см^3 соответственно. Отклонение объясняется, в частности, разбросом значений плотности.

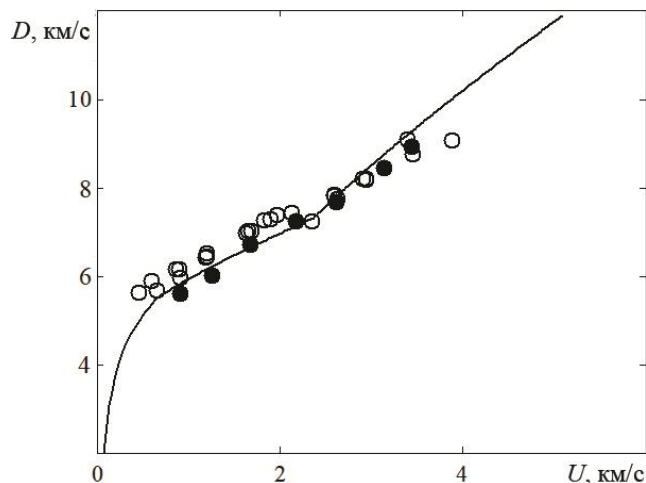


Рис. 1. Ударная адиабата энстатита. Расчет в переменных волновая–массовая скорости.

Экспериментальные данные: [10]

Fig. 1. Hugoniot curve for enstatite. The calculation is performed in terms of wave velocity and mass velocity. Experimental data are from [10]

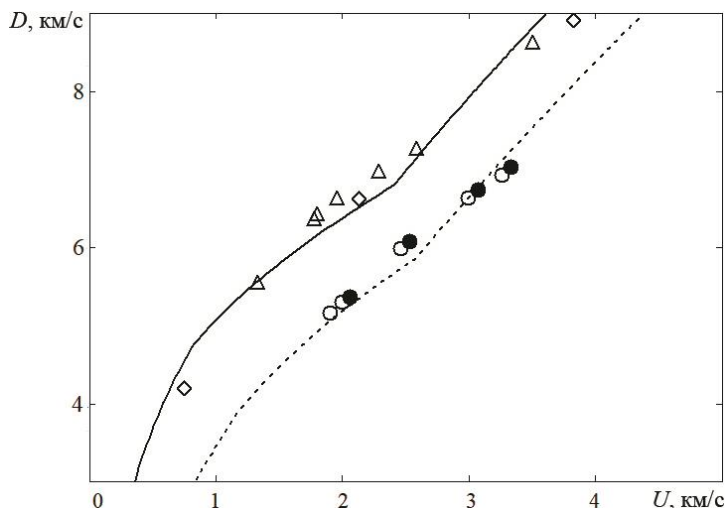


Рис. 2. Ударная адиабата пористого энстатита. Расчет: сплошная линия $\rho_0 = 2.361 \text{ г/см}^3$, пунктирная линия $\rho_0 = 2.836 \text{ г/см}^3$. Данные: треугольники, ромбы и светлые кружки [10]; темные кружки [11]

Fig. 2. Hugoniot curve for porous enstatite. The solid line indicates $\rho_0 = 2.361 \text{ g/cm}^3$; the dashed line, $\rho_0 = 2.836 \text{ g/cm}^3$; triangles, diamonds, and open circles, data from [10]; solid circles, data from [11]

Результаты моделирования для пористых образцов энстатита, имеющих значения плотности $\rho_0 = 2.836 \text{ г/см}^3$ и $\rho_0 = 2.361 \text{ г/см}^3$ показаны на рис. 2. На этом же рисунке приведены данные, которые получены в экспериментах для исследуемых образцов [10, 11]. Получено описание поведения пористых образцов энстатита в пределах точности эксперимента.

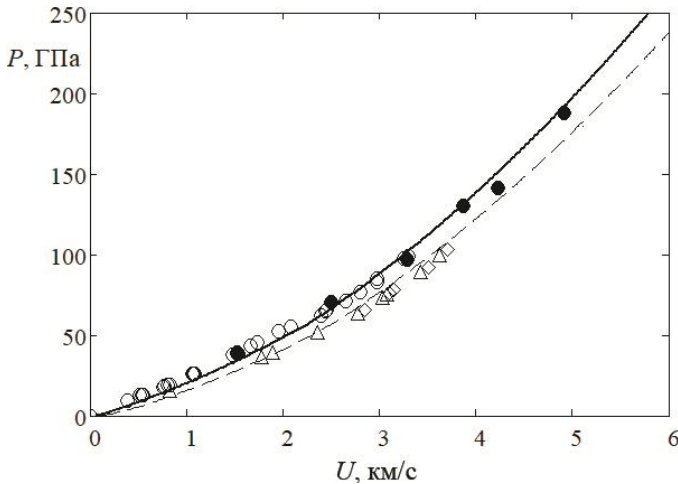


Рис. 3. Ударная адиабата форстерита $\rho_0 = 3.273 \text{ г/см}^3$. Расчет в переменных давление–массовая скорость. Расчет: сплошная линия $m = 1.03$, пунктирная линия $m = 1.08$; данные: светлые кружки, ромбы [10]; темные кружки, треугольники [11]

Fig. 3. Hugoniot curve for forsterite with $\rho_0 = 3.273 \text{ g/cm}^3$. The calculation is performed in terms of pressure and mass velocity. The solid line indicates $m = 1.03$; the dashed line, $m = 1.08$; open circles and diamonds, data from [10]; solid circles and triangles, data from [11]

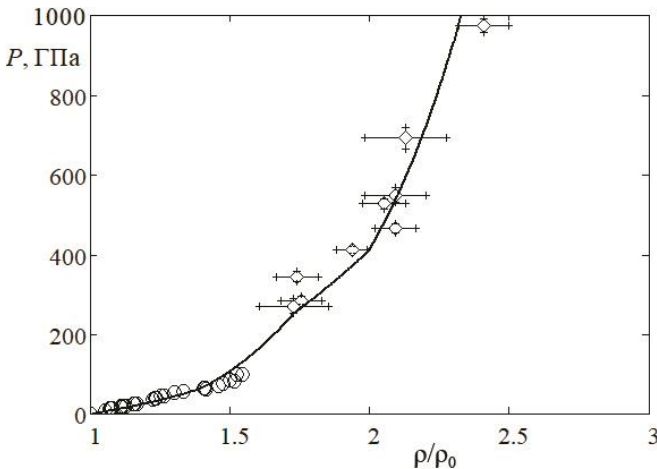


Рис. 4. Ударная адиабата форстерита $\rho_0 = 3.273 \text{ г/см}^3$. Расчет в переменных давление–сжатие. Расчет – сплошная кривая 1; данные: светлые кружки [10], ромбы [12]

Fig. 4. Hugoniot curve for forsterite with $\rho_0 = 3.273 \text{ g/cm}^3$. The calculation is performed in terms of pressure and compression. The solid line indicates the calculated data; open circles, data from [10]; diamonds, data from [12]

Результаты моделирования для форстерита $\rho_0 = 3.273 \text{ г/см}^3$ показаны на рис. 3. Значение пористости, определяемое как отношение плотностей сплошного и пористого образца, рассчитывалось по среднему значению исследованных образцов $m = 1.03, 1.08$. Данные, полученные в расчетах, соответствуют экспериментальным результатам по измерению значений волновой и массовой скоростей, полученных для пористых образцов энстатита.

Для верификации расчетов при более высоких значениях давления использовались экспериментальные данные, которые приведены в [12]. Результаты моделирования для форстерита в диапазоне значений давления до 1 ТПа и данные [10, 12] показаны на рис. 4 с учетом фазовых переходов SiO_2 и MgO . Для SiO_2 область фазового перехода определена в диапазоне 11–40 ГПа, для MgO – в диапазоне 250–400 ГПа. Получено достоверное описание имеющихся данных, при этом параметры, определенные для оксидов, позволили непротиворечиво описать данные для исследуемых образцов на уровне точности экспериментов.

Заключение

Хорошее соответствие модельных расчетов результатам, полученным для энстатита и форстерита на основании экспериментов, позволяет предположить, что используемая методика позволит достоверно моделировать термодинамические параметры, такие как давление, сжатие, температура, и для других сложных материалов, которые содержат компоненты, претерпевающие фазовые переходы при интенсивных динамических нагрузках. Проведено сравнение результатов моделирования с данными, полученными в экспериментах по ударно-волновому воздействию на исследуемые образцы. Рассматриваемая методика может быть полезна при расчетах для аналогичных сложных по составу материалов, таких как, в частности, андалузит Al_2SiO_5 , волластонит $\text{Ca}_3[\text{Si}_3\text{O}_9]$. Данный подход позволяет оценить вклад фазовых переходов материалов в изменение плотности мантии Земли в областях давлений, соответствующих фазовым переходам исследуемых материалов.

Список источников

1. *Borucki W.J.* Kepler mission: development and overview // Reports on Progress in Physics. 2016. V. 79. Art. 036901. doi:10.1088/0034-4885/79/3/036901
2. *Driscoll P.E.* Planetary interiors, magnetic fields and habitability // Handbook of Exoplanets / H.J. Deeg, J.A. Belmonte (eds.). Cham : Springer International Publishing, 2018. P. 1–18. doi: 10.1007/978-3-319-55333-7_76
3. *Duffy T.S., Smith R.F.* Ultra-high pressure dynamic compression of geological materials // Front. Earth Sci. 2019. V. 7 (23). P. 1–20. doi: 10.3389/feart.2019.00023
4. *Mosenfelder J.L., Asimow P.D., Ahrens T.J.* Thermodynamic properties of Mg_2SiO_4 liquid at ultra-high pressures from shock measurements to 200 GPa on forsterite and wadsleyite // Journal of Geophysical Research. 2007. V. 112. Art. B06208. doi: 10.1029/2006JB004364
5. *Kumazawa M., Sawamoto H., Ohtani E., Mazaki K.* Postspinel Phase of Forsterite and Evolution of the Earth's Mantle // Nature. 1974. V. 247. P. 356–358. doi: 10.17223/19988621/68/2
6. *Маевский К.К.* Численное исследование ударно-волнового нагружения металлических композитов на базе W и WC // Журнал технической физики. 2021. Т. 91, № 5. С. 815–820. doi: 10.21883/JTF.2021.05.50694.293-20

7. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. 3-е изд., испр. М. : Физматлит, 2008. 656 с.
8. Maevskii K.K., Kinelovskii S.A. Thermodynamic parameters of mixtures with epoxy as a component under shock wave loading // *Journal of Physics: IOP Conf. Series*. 2018. V. 946. Art. 012113. doi: 10.1088/1742-6596/946/1/012113
9. Маевский К.К., Кинеловский С.А. Термодинамические параметры смесей с нитридом кремния при ударно-волновом воздействии в представлениях равновесной модели // *Теплофизика высоких температур*. 2018. Т. 56, № 6. С. 876–881. doi: 10.31857/S004036440003564-4
10. LASL Shock Hugoniot Data / S.P. Marsh (ed.). Berkeley : Univ. California Press, 1980. 658 p.
11. Levashov P.R., Khishchenko K.V., Lomonosov I.V., Fortov V.E. Database on shock-wave experiments and equations of state available via Internet // *AIP Conf. Proc.* 2004. V. 706. P. 87–90. URL: <http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>
12. Sekine T., Ozaki N., Miyanishi K., Asaumi Y., Kimura T., Albertazzi B. et al. Shock compression response of forsterite above 250 GPa // *Sci. Adv.* 2016. V. 2. Art. e1600157. doi: 10.1126/sciadv.1600157

References

1. Borucki W.J. (2016) Kepler mission: development and overview. *Reports on Progress in Physics*. 79. Article 036901. doi: 10.1088/0034-4885/79/3/036901
2. Driscoll P.E. (2018) Planetary interiors, magnetic fields and habitability. *Handbook of Exoplanets*. pp. 1–18. doi: 10.1007/978-3-319-55333-7_76
3. Duffy T.S., Smith R.F. (2019) Ultra-high pressure dynamic compression of geological materials. *Frontiers in Earth Science*. 7(23). pp. 1–20. doi: 10.3389/feart.2019.00023
4. Mosenfelder J.L., Asimow P.D., Ahrens T.J. (2007) Thermodynamic properties of Mg_2SiO_4 liquid at ultra-high pressures from shock measurements to 200 GPa on forsterite and wadsleyite. *Journal of Geophysical Research*. 112. Article B06208. doi: 10.1029/2006JB004364
5. Kumazawa M., Sawamoto H., Ohtani E, Mazaki K. (1974) Postspinel phase of forsterite and evolution of the Earth's mantle. *Nature*. 247. pp. 356–358. doi: 10.17223/19988621/68/2
6. Maevskii K.K. (2021) Numerical study of shock-wave loading of the W- and WC-based metal composites. *Technical Physics*. 66(6). pp. 749–754. doi: 10.1134/S1063784221050145
7. Zel'dovich Ya.B., Raizer Yu.P. (1967) *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. New York: Academic Press.
8. Maevskii K.K., Kinelovskii S.A. (2018) Thermodynamic parameters of mixtures with epoxy as a component under shock wave loading. *Journal of Physics: IOP Conference Series*. 946. Article 012113. doi: 10.1088/1742-6596/946/1/012113
9. Maevskii K.K., Kinelovskii S.A. (2018) Thermodynamic parameters of mixtures with silicon nitride under shock-wave impact in terms of equilibrium model. *High Temperature*. 56(6). pp. 853–858. doi: 10.1134/S0018151X18060172
10. Marsh S.P. (ed.) (1980) *LASL Shock Hugoniot Data*. London: Univ. California Press.
11. Levashov P.R., Khishchenko K.V., Lomonosov I.V., Fortov V.E. (2004) Database on shock-wave experiments and equations of state available via Internet. *AIP Conference Proceedings*. 706. pp. 87–90. doi: 10.1063/1.1780190
12. Sekine T., Ozaki N., Miyanishi K., Asaumi Y., Kimura T., Albertazzi B., Sato Y., Sakawa Y., Sano T., Sugita S., Matsui T., Kodama R. (2016) Shock compression response of forsterite above 250 GPa. *Science Advances*. 2(8). Article 1600157. pp. 1–7. doi: 10.1126/sciadv.1600157

Сведения об авторе:

Маевский Константин Константинович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН; старший преподаватель кафедры теоретической механики механико-математического

факультета Новосибирского государственного университета, Новосибирск, Россия. E-mail: konstantinm@hydro.nsc.ru

Information about the author:

Maevskiy Konstantin K. (PhD in Physics and Mathematics, Senior Researcher, Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS; Senior Lecturer, Department of Theoretical Mechanics of MMF, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: konstantinm@hydro.nsc.ru

Статья поступила в редакцию 31.05.2022; принята к публикации 03.10.2022

The article was submitted 31.05.2022; accepted for publication 03.10.2022