

МОДЕЛЬ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ С ПЕРЕМЕННОЙ ТЕПЛОЕМКОСТЬЮ ЯДЕР И ЭЛЕКТРОНОВ С УЧЕТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ ДЕБАЯ. УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ БЕРИЛЛИЯ И АЛЮМИНИЯ

Д. Г. Гордеев, Л. Ф. Гударенко, В. Г. Куделькин
РФЯЦ-ВНИИЭФ

В рамках феноменологической термодинамики получена структура модели для разработки УРС металлов, предназначенных для использования в массовых производственных расчетах. Модель позволяет проводить нормировку на состояние металла при нормальных условиях. При низких температурах теплоемкость меняется в соответствии с теорией Дебая. Учитывается снятие вырождения электронного газа при температурах выше температуры Ферми. Модель содержит относительно небольшое число свободных параметров, большинство из которых имеет физический смысл. Возможности модели, область ее применимости продемонстрированы на примере разработки УРС Be и Al.

Введение

К настоящему времени в литературе описаны десятки полуэмпирических моделей уравнений состояния (УРС), рекомендованных для моделирования термодинамических свойств металлов. Уравнения состояния, использующие эти модели, отличаются областями применимости, числом свободных параметров, математической формой. Несмотря на многолетние исследования в этой области, вопрос о предпочтительности той или иной формы уравнения состояния в литературе, по-видимому, не решен. Одной из целей разработчиков УРС является создание моделей, позволяющих с использованием небольшого числа параметров описать достаточно широкую область состояний.

Модель уравнения состояния

В используемой в данной работе модели в соотношениях для расчета давления и удельной внутренней энергии выделены три составляющие

$$P(\delta, T) = P_x(\delta) + P_p(\delta, T) + P_e(\delta, T); \quad (1)$$

$$E(\delta, T) = E_x(\delta) + E_p(\delta, T) + E_e(\delta, T), \quad (2)$$

где $\delta = \rho/\rho_0$ – относительное сжатие; ρ – текущая плотность вещества; ρ_0 – плотность при нормальных условиях; P_x, E_x – потенциальные ("холодные") составляющие давления и удельной энергии; P_p, E_p – тепловые ("решеточные") составляющие давления и удельной энергии, связанные с тепловым движением ионов (ядер); P_e, E_e – тепловые составляющие, учиты-

вающие движение свободных термически возбужденных электронов.

Соответствующие составляющие в уравнениях (1), (2) связаны термодинамическим тождеством, являющимся условием их термодинамической согласованности

$$P = \rho^2 \left(\frac{\partial E}{\partial \rho} \right)_T + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho. \quad (3)$$

В зависимостях, используемых в данной модели для представления потенциальных составляющих, выделено три участка: $0 \leq \delta \leq 1$, $1 \leq \delta \leq \delta_c$, $\delta > \delta_c$; δ_c – точка начала сшивки зависимости $P_x(\delta)$, рассчитанной в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$ с использованием экспериментальной ударной адиабаты и параметров тепловых составляющих, принятых для уравнения состояния конкретного вещества, с зависимостью $P_x(\delta)$, рассчитанной в области сверхвысоких давлений и плотностей по теоретической модели УРС.

При $\delta = 1$ давление в веществе нормируется на нормальные условия $\rho = \rho_0$, $P_0 = 10^{-4}$ ГПа, $T = 293$ К. Таким образом, значение потенциального давления в точке $\delta = 1$ определяется разностью $P_0 - P_T$ ($\delta = 1$, $T = 293$ К). Обозначим его как P_{x0} . Значение $P_x = 0$ будет достигаться в точке $\rho = \rho_{0k}$ (ρ_{0k} – кристаллическая плотность вещества при $T = 0$).

Для представления потенциального давления в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$ используется зависимость вида

$$P_x(\delta) = a(\delta^n - 1) + P_{x0}. \quad (4)$$

Из соотношений (3) и (4) следует выражение для расчета потенциальной энергии в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$

$$E_x(\delta) = \frac{a}{\rho_0} \left[\left(\frac{\delta^{n-1}}{n-1} + \frac{1}{\delta} \right) - \left(\frac{1}{n-1} + 1 \right) \right] + P_{x0} \frac{\delta-1}{\rho_0 \delta} + E_{x0}. \quad (5)$$

Константа E_{x0} в формуле (5) выбирается из условия $E_x(\rho = \rho_{0k}) = 0$.

Параметры a и n выбираются из условия сшивки потенциального давления (4) до второй производной с расчетами на участке $1 \leq \delta \leq \delta_c$.

В модели УРС (1), (2), как и практически во всех полуэмпирических моделях, давление представляется как сумма потенциального и теплового. Если заданы параметры тепловых составляющих УРС, то потенциальные составляющие в диапазоне, где известна ударная адиабата, могут быть определены в табличном виде, как результат решения дифференциального уравнения.

Воспользуемся уравнением Гюгиони

$$E_\Gamma - E_0 = (P_\Gamma + P_0) \frac{k\delta-1}{2\rho_0\delta}, \quad (6)$$

законом сохранения импульса

$$P_\Gamma = P_0 + \rho_0 D U \frac{1}{k}, \quad (7)$$

законом сохранения массы

$$\delta = \frac{D}{(D-U)k}, \quad (8)$$

где $k = \rho_0/\rho_{00}$ – коэффициент пористости вещества; D – скорость фронта ударной волны; U – массовая скорость за фронтом; P_Γ , E_Γ – давление и энергия на фронте ударной волны.

Уравнения (6)–(8) дополняются ударной адиабатой вещества в виде $D(U)$ зависимости. Уравнения (1), (2) и (6)–(8) позволяют составить дифференциальное уравнение для определения температуры T за фронтом ударной волны. Перепишем уравнения (1), (2) в виде

$$P(\delta, T) = P_x(\delta) + P_T(\delta, T) = \rho_0 \delta^2 E'_x(\delta) + P_T(\delta, T); \\ E(\delta, T) = E_x(\delta) + E_T(\delta, T),$$

где $P_T(\delta, T)$, $E_T(\delta, T)$ – тепловые составляющие уравнения состояния. Здесь использовано известное уравнение, связывающее потенциальное давление с потенциальной энергией и являющееся следствием термодинамического тождества

$$P_x(\delta) = \rho_0 \delta^2 E'_x(\delta).$$

Учитывая, что на ударной адиабате $P(\delta, T) = P_T(\delta)$, $E(\delta, T) = E_T(\delta)$, получаем два уравнения

$$P_\Gamma(\delta) = \rho_0 \delta^2 E'_x(\delta) + P_T(\delta, T); \quad (9)$$

$$E_\Gamma(\delta) = E_x(\delta) + E_T(\delta, T). \quad (10)$$

Продифференцируем (10) по δ , причем производную от $E_T(\delta, T)$ будем брать вдоль ударной адиабаты

$$E'_x(\delta) + \left(\frac{\partial E_T}{\partial \delta} \right)_T + \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_\delta \left(\frac{dT}{d\delta} \right)_\Gamma = E'_T(\delta).$$

Тогда с учетом формулы (9) можно записать

$$E'_T(\delta) - \left(\frac{\partial E_T}{\partial \delta} \right)_T - \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_\delta \left(\frac{dT}{d\delta} \right)_\Gamma = \frac{P_\Gamma(\delta) - P_T(\delta, T)}{\rho_0 \delta^2}.$$

Таким образом, получено обыкновенное дифференциальное уравнение относительно температуры $T(\delta)$ на ударной адиабате

$$\left(\frac{dT}{d\delta} \right)_\Gamma = \frac{E'_T(\delta) - \left(\frac{\partial E_T}{\partial \delta} \right)_T - \frac{P_\Gamma(\delta) - P_T(\delta, T)}{\rho_0 \delta^2}}{\left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_\delta}, \\ [T(\delta=1) = 293 \text{ K}]. \quad (11)$$

В результате решения (11) находится таблица значений температуры от плотности вдоль ударной адиабаты – $T_i(\delta_i)$. В точках, где известна температура, потенциальные составляющие вычисляются по формулам

$$P_{x_i}(\delta_i) = P_\Gamma(\delta_i) - P_T(\delta_i, T_i)$$

$$\text{и } E_{x_i}(\delta_i) = E_\Gamma(\delta_i) - E_T(\delta_i, T_i). \quad (12)$$

Уравнение (11) может использоваться для любой модели уравнения состояния, позволяющей выполнять расчеты термодинамических функций по входным переменным плотность – температура. Расчеты проводятся до значения δ_c , находящегося в диапазоне, где определена ударная адиабата.

Обычно непосредственно в расчетах используются не таблицы $P_{x_i}(\delta_i)$ и $E_{x_i}(\delta_i)$, а результаты их аппроксимации, поэтому расчет по формулам (11), (12) таблицы значений $P_x(\delta)$ проводится только на этапе подбора параметров УРС. В данной работе для аппроксимации используются интерполяционные кубические сплайны класса C^2 [1]. На участках $[\delta_i, \delta_{i+1}]$ сплайн имеет вид

$$P_x(\delta) = P_{x_i} + h_i t [m_i + t(B_i + tA_i)], \quad (13)$$

где $A_i = -2 \frac{P_{x_{i+1}} - P_{x_i}}{h_i} + (m_{i+1} + m_i)$; $B_i = -A_i + \frac{P_{x_{i+1}} - P_{x_i}}{h_i} - m_i$; $t = \frac{\delta - \delta_i}{h_i}$; $h_i = \delta_{i+1} - \delta_i$, P_{x_i} – значение функции в точке δ_i ; $m_i \equiv \left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=\delta_i}$ – коэффициенты, определяемые из условий непрерывности вторых производных в узлах. Для определения m_i необходимо задать значения первых производных $P_x(\delta)$ в точках $\delta = 1$, $\delta = \delta_c$, являющихся границами участка, аппрок

симируемого сплайнами. Они вычисляются по заданной $D(U)$ зависимости. В точке $\delta = 1$ имеет место касание второго порядка ударной адиабаты с нормальной изэнтропой, и можно записать

$$\left. \frac{dP_T}{d\delta} \right|_{\delta=1} = \left. \left(\frac{\partial P}{\partial \delta} \right)_S \right|_{\delta=1, T=293},$$

где $\left. \frac{dP_T}{d\delta} \right|_{\delta=1} = \rho_0 D_0^2$, $D_0 = D(U = 0)$.

Тогда наклон холодной кривой в точке $\delta = 1$ вычисляется по формулам

$$\left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=1} = \rho_0 D_0^2 - \left. \left(\frac{\partial P_T}{\partial \delta} \right)_S \right|_{\delta=1, T=293}.$$

В приведенных выражениях D_0 имеет смысл изэнтропической скорости звука C_0 в точке $\rho = \rho_0$, ($\delta = 1$).

В точке $\delta = \delta_c$ значение наклона холодной кривой определяется при решении дифференциального уравнения (11) по формуле

$$\left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=\delta_c} = P'_T(\delta_c) - \left. \left(\frac{\partial P_T}{\partial \delta} \right)_T \right|_{\delta=\delta_c} - \left. \left(\frac{\partial P_T}{\partial T} \right)_\delta \left(\frac{dT}{d\delta} \right)_T \right|_{\delta=\delta_c}.$$

C_0 и $P'_c = \left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=\delta_c}$ являются задаваемыми параметрами

УРС.

Потенциальная энергия на участке $1 \leq \delta \leq \delta_c$ записывается в виде

$$E_x(\delta) = E_{x0} + \frac{1}{\rho_0} \left[\Phi(\delta_i, \delta) + \sum_{j=1}^i \Phi(\delta_{j-1}, \delta_j) \right], \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(\delta_i, \delta) &= \frac{A_i t^2}{2} + (B_i - 2A_i \tau_i) t + \\ &+ [m_i + \tau_i (3A_i \tau_i - 2B_i)] \ln \frac{\delta}{\delta_i} + \\ &+ \left[\delta_i (m_i + \tau_i (A_i \tau_i - B_i)) - P_{x_i} \right] \left(\frac{1}{\delta} - \frac{1}{\delta_i} \right), \\ \delta_i < \delta \leq \delta_{i+1}, \quad \tau_i &= \frac{\delta_i}{h_i}. \end{aligned}$$

При $\delta > \delta_c$ потенциальные составляющие давления и энергии рассчитываются по алгоритму, обеспечивающему переход от зависимости $P_x(\delta)$, рассчитанной по уравнениям (13), (14), к зависимости, рассчитанной по модели ТФП [2]. Для обеспечения непрерывности функции и ее производной в точке $\delta = \delta_c$ используется алгоритм, аналогичный применяемому в программе PANDA [3]. По данному алгоритму при $\delta \geq \delta_c$ для расчета потенциальной составляющей энергии используется следующая формула:

$$E_x(\delta) = (E_{TФП}(\delta) - E_{TФП}(\delta_c)) Y(\delta) + \Delta E_x, \quad (15)$$

откуда с помощью основного термодинамического тождества получается формула для вычисления давления

$$\begin{aligned} P_x(\delta) &= P_{TФП}(\delta) Y(\delta) + \\ &+ \delta^2 \rho_0 (E_{TФП}(\delta) - E_{TФП}(\delta_c)) \frac{dY}{d\delta}. \end{aligned} \quad (16)$$

В формулах (15), (16) $P_{TФП}(\delta)$, $E_{TФП}(\delta)$ – давление и энергия, рассчитываемые по модели ТФП [2], $Y(\delta) = 1 + (b_1 + b_2 \delta^{-\alpha} + b_3 \delta^{-2\alpha}) \delta^{-1}$ – интерполяционная функция. Константы ΔE_x , b_1 , b_2 и b_3 выбираются из условий непрерывности функций и их производных в точке δ_c

$$\begin{aligned} E_x(\delta_c) &= E_S(\delta_c); \quad P_x(\delta_c) = P_S(\delta_c); \quad P'_x(\delta_c) = P'_S(\delta_c), \\ P''_x(\delta_c) &= P''_S(\delta_c), \end{aligned}$$

где индексом "s" обозначены значения давления и энергии, рассчитываемые по формулам (13) и (14), штрихом – производные давления по сжатию. Очевидно, что $\Delta E_x = E_S(\delta_c)$. Параметр α определяет скорость приближения значения потенциального давления, рассчитанного по данной модели, к значениям, рассчитанным по модели ТФП [2].

Для описания вклада атомов решетки в тепловую часть энергии взято выражение, используемое в модели УРС [4], помноженное на функцию Дебая

$$E_p(\delta, T) = D(z) \frac{2\psi_p(\delta) + T C_{V0} T}{\psi_p(\delta) + T}, \quad (17)$$

где $D(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z t^3 dt / (e^t - 1)$ – функция Дебая; $z = \frac{\theta(\delta, T)}{T}$;

$\theta(\delta, T)$ – температура Дебая; C_{V0} – теплоемкость решетки при нормальных условиях; $\Gamma_{p0}(\delta)$ – функция, характеризующая зависимость коэффициента Грюнайзена ядер (решетки) "холодного" вещества от плотности (при $T \cong 0$); $\psi_p(\delta)$ – функция, характеризующая высоту потенциального барьера, который нужно преодолеть атому, чтобы уйти из узла решетки, и зависящая только от плотности (расстояния между атомами); γ_ϕ – асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена решетки при $T \rightarrow \infty$.

Примем свободную энергию в виде, соответствующем свободной энергии в форме Дебая без учета членов, не зависящих от температуры

$$F_p(\delta, T) = C_{V0} T \left(\ln(1 - e^{-z}) - \frac{1}{3} D(z) \right). \quad (18)$$

Для нахождения вида функции $\theta(\delta, T)$ воспользуемся уравнением связи между внутренней и свободной энергией

$$F(\delta, T) = E(\delta, T) + T \left(\frac{\partial F(\delta, T)}{\partial T} \right)_\delta.$$

Решение этого дифференциального уравнения дает следующий вид $\theta(\delta, T)$:

$$\theta(\delta, T) = \theta_D(\delta) \sqrt{1 + T/\psi_P(\delta)}; \quad \theta_D(\delta) = \theta(\delta, 0)$$

при произвольном виде $\psi_P(\delta)$.

Связь $\theta_D(\delta)$ с коэффициентом Грюнайзена определяется следующим образом:

$$\theta_D(\delta) = \theta_0 \exp\left(\int_1^{\delta} \frac{\Gamma_{P0}(x)}{x} dx\right); \quad \theta_0 = \theta_D(1).$$

Дифференцированием (18) по плотности получим выражение для давления

$$P_P(\delta, T) = D(z) \frac{2\psi_P(\delta)\Gamma_{P0}(\delta) + T\gamma_\Phi}{\psi_P(\delta) + T} \rho_0 \delta T \frac{C_{V0}}{2}, \quad (19)$$

при условии, что функции $\psi_P(\delta)$ и $\Gamma_{P0}(\delta)$ как и в [4] связаны дифференциальным уравнением

$$\frac{d\psi_P(\delta)}{\psi_P(\delta)} = [2\Gamma_{P0}(\delta) - \gamma_\Phi] \frac{d\delta}{\delta}. \quad (20)$$

Решение (20) относительно $\psi_P(\delta)$ имеет общий вид

$$\psi_P(\delta) = \psi_{P0} \delta^{-\gamma_\Phi} \exp\left(2 \int_1^{\delta} \Gamma_{P0}(\tau) \frac{d\tau}{\tau}\right), \quad (21)$$

где $\psi_{P0} = \psi_P(1)$.

Из (17) и (19) следуют выражения для коэффициента Грюнайзена и теплоемкости ионов

$$\Gamma_P(\delta, T) = \frac{2\psi_P(\delta)\Gamma_{P0}(\delta) + T\gamma_\Phi}{2\psi_P(\delta) + T}; \quad (22)$$

$$C_V(\delta, T) = D\left(\frac{\theta(\delta, T)}{T}\right) \left(\frac{\psi_P^2(\delta)}{(\psi_P(\delta) + T)^2} + 1\right) \frac{C_{V0}}{2} + D'_{\theta/T} \left(\frac{\theta(\delta, T)}{T}\right) \frac{2\psi_P(\delta) + T}{\psi_P(\delta) + T} \frac{C_{V0} T}{2} \frac{\partial\left(\frac{\theta(\delta, T)}{T}\right)}{\partial T}, \quad (23)$$

где $D'_{\theta/T}\left(\frac{\theta(\delta, T)}{T}\right)$ – производная от функции Дебая

по аргументу, а производная аргумента по температуре

$$\frac{\partial\left(\frac{\theta(\delta, T)}{T}\right)}{\partial T} = \frac{-\theta(\delta, T)}{2T^2} \left[1 + \frac{\psi_P(\delta)}{\psi_P(\delta) + T}\right].$$

Из (22), (23) следуют предельные переходы

$$\left. \begin{array}{l} C_V(\delta, T) \rightarrow 0 \\ \Gamma_P(\delta, T) \rightarrow \Gamma_{P0}(\delta) \\ P_P(\delta, T) \rightarrow 0 \\ E_P(\delta, T) \rightarrow 0 \end{array} \right\} \text{при } \frac{T}{\psi_P(\delta)} \rightarrow 0, \text{ твердое тело}$$

по теории Дебая,

$$\left. \begin{array}{l} C_V(\delta, T) \rightarrow \frac{C_{V0}}{2} \\ \Gamma_P(\delta, T) \rightarrow \gamma_\Phi \\ P_P(\delta, T) \rightarrow \rho_0 \delta \frac{C_{V0} T}{2} \gamma_\Phi \\ E_P(\delta, T) \rightarrow \frac{C_{V0} T}{2} \end{array} \right\} \text{при } \frac{T}{\psi_P(\delta)} \rightarrow \infty, \text{ идеальный газ.}$$

Для описания функции $\Gamma_{P0}(\delta)$ используется зависимость вида [5]

$$\Gamma_{P0}(\delta) = \gamma_1 + (\gamma_0 - \gamma_1) \frac{\alpha_p^2 + \ln^2 \delta_m}{\alpha_p^2 + \ln^2(\delta/\delta_m)}, \quad (24)$$

где γ_0 – значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях; γ_1 – асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена $\Gamma_{P0}(\delta)$ при $\delta \rightarrow 0$ и $\delta \rightarrow \infty$; α_p – параметр, определяющий скорость выхода функции $\Gamma_{P0}(\delta)$ на асимптотическое значение; δ_m – параметр, определяющий значение δ в точке максимума функции $\Gamma_{P0}(\delta)$.

Из соотношений (20) и (24) получим выражение для расчета $\psi_P(\delta)$

$$\psi_P(\delta) = \psi_{P0} \delta^{2\gamma_1 - \gamma_\Phi} \exp\left(2(\gamma_0 - \gamma_1) \frac{\alpha_p^2 + \ln^2 \delta_m}{\alpha_p} \times \left[\arctg\left(\frac{1}{\alpha_p} \ln\left(\frac{\delta}{\delta_m}\right)\right) - \arctg\left(\frac{\ln \delta_m}{-\alpha_p}\right)\right]\right).$$

Выражение для расчета энтропии получается при дифференцировании свободной энергии (18) по температуре при постоянном удельном сжатии

$$S_P(\delta, T) = -\left(\frac{\partial F_P(\delta, T)}{\partial T}\right)_\delta = C_{V0} \left(\frac{1}{2} D(z) \left(\frac{\psi_P(\delta, T)}{\psi_P(\delta, T) + T} + \frac{5}{3}\right) - \ln(1 - e^{-z})\right). \quad (25)$$

С использованием связи закона плавления Линдемана с коэффициентом Грюнайзена решетки [6] получена относительно простая зависимость для расчета температуры на линии плавления через параметры данной модели УРС

$$T_m(\delta) = T_{m0} \left(\frac{\delta}{\delta_{m0}}\right)^{\gamma_\Phi - \frac{2}{3}} \frac{\psi(\delta)}{\psi(\delta_{m0})}, \quad (26)$$

где T_{m0} , δ_{m0} – температура и относительное сжатие вещества в точке плавления при $P = 1$ атм.

Электронный вклад в тепловую часть давления и энергии определяется следующими формулами [7]:

$$P_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} \rho_0 \delta \gamma_e \frac{T^2}{T_{\Phi} \delta^{\gamma_e} + T}; \quad (27)$$

$$E_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} \frac{T^2}{T_{\Phi} \delta^{\gamma_e} + T}. \quad (28)$$

Электронная теплоемкость $C_{Ve} = (\partial E_e / \partial T)_p$ является функцией плотности и температуры

$$C_{Ve}(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T T_{\Phi} \frac{2 T_{\Phi} \delta^{\gamma_e} + T}{(T_{\Phi} \delta^{\gamma_e} + T)^2}$$

и имеет следующие предельные значения:

$$\text{при } T \rightarrow 0, \quad C_{Ve} \rightarrow \beta_0 T \delta^{-\gamma_e};$$

$$\text{при } T \rightarrow \infty, \quad C_{Ve} \rightarrow \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi}.$$

Таким образом, при низких температурах электронный газ ведет себя как полностью вырожденный – $C_{Ve} \sim T$, а энергия $E_e \sim T^2$, при высоких температурах это свободный электронный газ – $C_{Ve} = \text{const}$, $E_e \sim T$. Параметр T_{Φ} имеет смысл температуры Ферми и является подгоночным. Так как при $T \rightarrow \infty$ теплоемкость полностью ионизованного электронного газа $C_{Ve} = (3RZ)/(2A)$, то T_{Φ} определяется с использованием соотношения $T_{\Phi} = (3RZ)/(\beta_0 A)$, что обеспечивает выполнение правильного асимптотического значения C_{Ve} при $T \rightarrow \infty$. Из условий $\delta \rightarrow \delta_{\max}$, $P \rightarrow \infty$, $T \rightarrow \infty$ получено соотношение, связывающее максимальное сжатие металла на ударной адиабате δ_{\max} с другими параметрами уравнения состояния

$$\delta_{\max} = 2 \frac{C_{V0} + \beta_0 T_{\Phi}}{C_{V0} \gamma_{\Phi} + \beta_0 T_{\Phi} \gamma_e} + 1.$$

При подборе параметров подгоночным (задаваемым) является параметр δ_{\max} , а параметр γ_e вычисляется по формуле

$$\gamma_e = \frac{1}{\beta_0 T_{\Phi}} \left(2 \frac{C_{V0} + \beta_0 T_{\Phi}}{\delta_{\max} - 1} - C_{V0} \gamma_{\Phi} \right). \quad (29)$$

Выражение для свободной энергии, соответствующее формулам (27), (28), имеет вид

$$F_e(\delta, T) = -\frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} T \ln \left(1 + \frac{T}{T_{\Phi} \delta^{\gamma_e}} \right).$$

Энтропия электронов

$$S_e(\delta, T) = - \left(\frac{\partial F_e(\delta, T)}{\partial T} \right)_{\delta} = \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} \left(\ln \left(1 + \frac{T}{T_{\Phi} \delta^{\gamma_e}} \right) + \frac{T}{T + T_{\Phi} \delta^{\gamma_e}} \right).$$

Полная энтропия рассчитывается по формулам

$$S(\delta, T) = S_p(\delta, T) + S_e(\delta, T) + S_0,$$

где $S_0 = S_{298}^0 - S_p(\delta = 1, T = T_0) - S_e(\delta = 1, T = T_0)$ обеспечивает нормировку энтропии на стандартное значение S_{298}^0 при нормальной температуре; T_0 – значение температуры при нормальных условиях.

Параметры уравнений состояния алюминия и бериллия

С использованием описанной модели разработаны уравнения состояния Ве и Al. Параметры уравнений состояния можно разделить на три группы. Первая группа – параметры, используемые при расчете потенциальных составляющих. К ним относятся коэффициенты зависимости $P_x(\delta)$ (4) для расчета в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$, коэффициенты сплайна (13) для расчета в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$, значение δ_c – точки начала сшивки с холодной кривой, рассчитанной по модели ТФП, атомная масса A и атомный номер Z вещества для расчета P_x по модели ТФП и коэффициенты зависимости (16) для расчета $P_x(\delta)$ в диапазоне $\delta > \delta_c$.

Для расчета по уравнениям (11), (12) таблиц зависимостей $P_x(\delta)$ в области, где известны ударные адиабаты, использованы $D(U)$ зависимости, полученные в результате аппроксимации экспериментальных данных для бериллия [8–12]

$$D(U) = 7,9656 + 1,1264U + 0,00273U^2.$$

Для алюминия [9, 13–15]

$$D(U) = 5,278 + 0,889U + \frac{15,18U}{27,33 + U}.$$

Для точек начала сшивки зависимостей $P_x(\delta)$, рассчитываемых из $D(U)$, с зависимостями $P_x(\delta)$, рассчитываемыми по модели ТФП [2], выбраны значения сжатия $\delta_c = 2,1$ для бериллия и $\delta_c = 2,3$ – для алюминия.

Параметры a и n зависимости $P_x(\delta)$ (4) (при $\delta \leq 1$) однозначно определяются из условий равенства первой и второй производных функций (4) со значениями, рассчитанными по сплайнам в точке $\delta = 1$. Значения P_x в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$ рассчитываются автоматически на стадии подбора тепловых параметров по заданной $D(U)$ зависимости на ударной адиабате сплошных образцов. Получаемая таким образом табличная зависимость $P_x(\delta)$ аппроксимируется с помощью сплайнов (13), (14) с достаточной точностью с использованием четырех узлов на участке $(1, \delta_c)$. Значения коэффициентов b_i зависимости (15), (16) также однозначно определяются значениями сшиваемых функций в точке δ_c . Подгоночными являются только два: точка сшивки δ_c и параметр интерполяционной функции α , отвечающий за скорость выхода зависимости $P_x(\delta)$ на данные, рассчитанные по модели ТФП.

Вторая и третья группы параметров используются при расчете теплового вклада в давление и энергию ядер и электронов. Значения большинства из этих параметров известны по справочным данным или могут быть оценены по теоретическим соотношениям. Так данные о коэффициенте Грюнайзена решетки при нормальных условиях γ_0 приведены в специальной литературе (см., например, [16]). Параметр ψ_{P0} может быть оценен по соотношению

$$\psi_{P0} = Q_{св} / C_{V0}, \quad (30)$$

где $Q_{св}$ – энергия связи; C_{V0} – изохорическая теплоемкость решетки при нормальных условиях. Значение теплоемкости приведено в справочной литературе (см., например, [16]), ее также можно оценить, используя закон Дюлонга–Пти. Данные об энергии связи $Q_{св}$ приведены в специальной литературе (см., например, [16]). Оценка по соотношению (30) для бериллия дает значение $\psi_{P0} \approx 22500$ К, что составляет $\approx 15 T_{m0}$. Аналоги параметра ψ_{P0} имеются и в других моделях УРС, описанных в литературе (см., например, [6, 7, 17–19]). В работах [6, 19] параметр ψ_{P0} связывают с температурой плавления при нормальных условиях и рекомендуют принимать $\psi_{P0} \approx 10 T_{m0}$. Отчасти, основанием для этого являются результаты расчетов с использованием простейших моделей жидкости, которые описывались зависимостью $C_V(\rho, T)$, отличающейся от используемой нами зависимости вида (23). Если применить отмеченную в [6] закономерность к зависимости $C_V(\rho, T)$ (23), то получим рекомендуемый диапазон $\psi_{P0} \approx (20 \div 30) T_{m0}$. Окончательно значение параметра ψ_{P0} выбирается при описании моделью УРС всей совокупности экспериментальных данных. Значение температуры Дебая приведено в справочной литературе (см., например, [16]). Значение ψ_{P0} и остальных параметров, относящихся к расчету вклада атомов, – γ_{ϕ} , δ_m , α_p , γ_1 –

подобраны из условия наилучшего описания всей совокупности экспериментальных данных.

Известны формула для теоретической оценки коэффициента электронной теплоемкости β_0 (см., например, [20]) и справочные данные (см., например, [16]). Параметр γ_e определяется с использованием соотношения (29). Величина δ_{\max} находится из расчетов ударной адиабаты по модели ТФПК [2, 21].

Для расчета термодинамических функций по модели достаточно задать 29 параметров, из которых подгоночными являются максимум 10. Остальные однозначно определяются по имеющимся экспериментальным и справочным данным (ρ_0, A, Z, \dots) или насчитываются на стадии подбора параметров (T_{ϕ}, γ_e , коэффициенты сплайна, ...). Подгоночные параметры подбираются из учета наилучшего описания экспериментальных и расчетных данных. Для этого находится минимум функционала среднеквадратичного отклонения значений термодинамических величин, рассчитанных по УРС от соответствующих экспериментальных данных или данных, полученных с помощью теоретических моделей, адекватно описывающих состояние вещества в некотором диапазоне плотностей и температур

$$\Omega(\{\tilde{x}_i\}) = \sum_{j=1}^m W_j \sum_{i=1}^{n_j} w_i \frac{(\tilde{x}_i - x_i)^2}{x_i^2}.$$

Здесь m – число типов данных; n_j – число данных одного типа; w_i – вес вклада i -й разности в функционал; W_j – вес вклада данных j -го типа в функционал; \tilde{x}_i – величины, рассчитанные по УРС; x_i – соответствующие им экспериментальные или рассчитанные по теоретическим моделям данные. Весовые множители определяют: w_i – степень доверия к конкретным данным; W_j – важность описания данных конкретного типа.

Подобранные параметры уравнений состояния Ве и Al приведены в таблице.

Параметры уравнений состояния бериллия и алюминия

Обозначение	Параметр	Значение		Размерность
		Al	Ве	
ρ_0	Плотность при нормальных условиях	2,71	1,85	г/см ³
C_0	Скорость звука при нормальных условиях	5,278	7,9656	км/с
δ_1	Значения δ и P_x в узлах сплайна (13)	1,3	1,1	1
P_{x1}		34,104	12,717	ГПа
δ_2		1,72	1,17	1
P_{x2}		132,69	23,697	ГПа
δ_3		1,97	1,3	1
P_{x3}		224,68	48,111	ГПа
δ_4		2,07	1,69	1
P_{x4}		268,61	154,4	ГПа
δ_c		Значение δ и P_x в точке начала сшивки зависимости $P_x(\delta)$, рассчитанной по ударной адиабате, с расчетами по модели ТФП	2,3	2,1
P_{xc}	382,67		325,61	ГПа
P'_c	$(dP_x/d\delta)_{\delta=\delta_c}$	528,79	501,59	ГПа

Обозначение	Параметр	Значение		Размерность
		Al	Be	
A	Атомная масса	26,98	9,012	1
Z	Атомный номер	13	4	1
α	Параметр, отвечающий за "скорость перехода" на расчет $P_x(\delta)$ по модели ТФП	1	0,01	1
C_{v0}	Теплоемкость решетки при нормальных условиях	$9,2446 \cdot 10^{-4}$	$2,92 \cdot 10^{-3}$	кДж/(г·К)
ψ_0	Значение функции $\psi_p(\delta)$ при $\delta = 1$	36310	22500	К
γ_0	Коэффициент Грюнайзена решетки при $\delta = 1$	2,14	1,1	1
γ_1	Коэффициент Грюнайзена решетки при $\delta \rightarrow \infty$ или $\delta \rightarrow 0$	0,4	0,55	1
δ_m	Значение δ в точке максимума функции $\Gamma_{p0}(\delta)$	0,958	0,746	1
α_p	Параметр, определяющий "скорость выхода" функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ на асимптотическое значение $\delta \rightarrow 0$ и $\delta \rightarrow \infty$	0,5524	0,4	1
γ_Φ	Коэффициент Грюнайзена решетки при $T \rightarrow \infty$	0,67	0,5	1
T_{m0}	Температура в точке плавления при $P \approx 1$ атм	933	1560	К
δ_{m0}	Значение $\delta = \rho_{m0} / \rho$ в точке плавления при $P \approx 1$ атм	0,941	0,924	1
θ	Температура Дебая	378	1031	К
β_0	Коэффициент электронной теплоемкости	$5,05 \cdot 10^{-8}$	$2,48 \cdot 10^{-8}$	кДж/(г·К ²)
δ_{max}	Значение максимального сжатия на ударной адиабате, $(dP_\Gamma / d\delta) \rightarrow \infty$ при $\delta \rightarrow \delta_{max}$	5,02	4,4676	1
S_{298}^0	Стандартная энтропия	$1,05 \cdot 10^{-3}$	$1,05 \cdot 10^{-3}$	кДж/(г·К)

Примечание: 1. В соответствии с (29) коэффициенты Грюнайзена электронов имеют следующие значения: для бериллия $\gamma_e = 0,597$, для алюминия – $\gamma_e = 0,484$.

2. Приведенные в таблице нормальные плотности ρ_0 соответствуют $T = 293$ К, $P = 10^{-4}$ ГПа (1 атм). В этом состоянии начальные энергии: в бериллии – $E_0 = 0,1907$ кДж/г, в алюминии – $E_0 = 0,1653$ кДж/г. При $T = 0$ кристаллические плотности: бериллия $\rho_{ок} = 1,856$ г/см³, алюминия $\rho_{ок} = 2,744$ г/см³.

Сравнение расчетов по УРС бериллия с экспериментальными данными и расчетами по другим моделям

На рис. 1 в координатах плотность – температура представлены расчетные и экспериментальные данные по тепловому расширению бериллия. Эксперименталь-

ные данные [22, 23] до $T \approx 1200$ К хорошо описываются расчетами по УРС данной работы. Показанные на рис. 2 экспериментальные данные из [24] свидетельствуют о сильном влиянии на тепловое расширение технологии изготовления и термообработки бериллия.

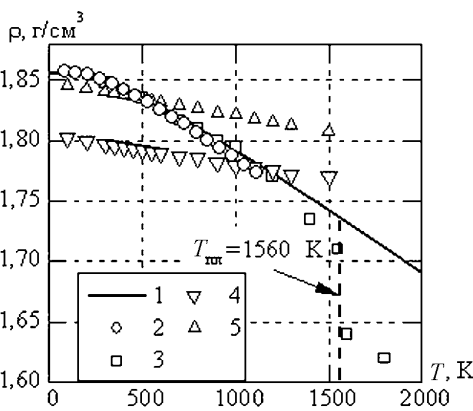


Рис. 1. Зависимости плотности бериллия от температуры при нормальном давлении: 1 – расчет по УРС данной работы. Экспериментальные данные: 2 – аппроксимация данных по тепловому расширению из [23]; 3 – данные по тепловому расширению из [22]; 4 – данные по тепловому расширению для холоднпрессованного и спеченного бериллия из [24]; 5 – данные по тепловому расширению для горячпрессованного бериллия из [24]

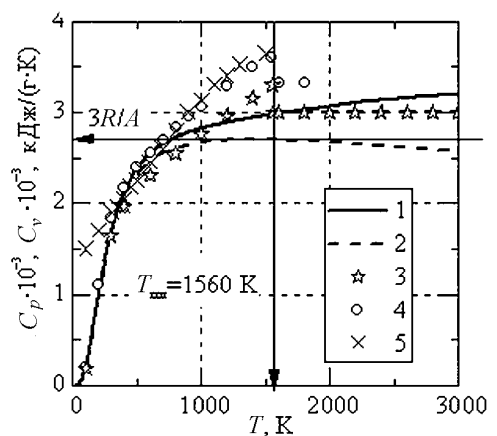


Рис. 2. Зависимости теплоемкости бериллия от температуры при нормальном давлении. Расчет по УРС данной работы: 1 – C_p ; 2 – C_v . Экспериментальные данные: 3 – C_p [25]; 4 – C_p [22]; 5 – C_p [24] (для бериллия чистотой 99,9 %, полученного спеканием порошков)

На рис. 2 приведены экспериментальные данные по изобарической теплоемкости и рассчитанные по УРС данной работы зависимости от температуры изохорической и изобарической теплоемкости бериллия при нормальном давлении. Учитывая, что уравнение состояния настоящей работы однофазное и не описывает изменение термодинамических функций при плавлении, можно заключить, что описание в среднем расчетом по УРС экспериментальных данных для $C_p(T)$ из [25] хорошее.

На рис. 3 в координатах давление – плотность представлены нормальные изотермы ($T = 293$ К): полученная в результате аппроксимации экспериментальных данных из [26]; рекомендованная в [27]; рассчитанная по УРС данной работы. При подборе параметров приоритет был отдан данным из [27], где представлены результаты критической обработки экспериментов по статическому и ударно-волновому сжатию бериллия. На рис. 4 в координатах давление – плотность представлены ударные адиабаты сплошного бериллия. Результаты расчетов по УРС настоящей работы, КСМ [28] и ТФПК [2, 21] сравниваются с экспериментальными данными [8–12]. Для всех уравнений состояния ударные

адиабаты рассчитаны из состояния $\rho_0 = 1,85$ г/см³, $P = 10^{-4}$ ГПа. Из результатов, приведенных на рис. 4, следует, что УРС данной работы хорошо описывает эксперименты по исследованию ударной адиабаты сплошного бериллия и результаты расчетов по теоретическим моделям КСМ [28], ТФПК [2, 21] в области сверхвысоких давлений (до предельного сжатия). На рис. 5 показаны рассчитанные по тем же УРС ударные адиабаты бериллия для образцов с начальной плотностью ρ_{00} : 1,31 г/см³; 0,92 г/см³; 0,46 г/см³. Рассчитанные по УРС данной работы ударные адиабаты в области высоких давлений хорошо и удовлетворительно согласуются с расчетами по УРС ТФПК [2, 21] и КСМ [28]. Расхождение между результатами расчетов по УРС данной работы и расчетами по ТФПК и КСМ увеличивается с уменьшением начальной плотности образцов (см. рис. 5). Зависимость изэнтропической скорости звука в ударно-сжатом бериллии от давления, рассчитанная по УРС данной работы, приведена на рис. 6, там же даны и экспериментальные данные из [29]. Экспериментальные данные имеют значительный разброс, который затрудняет выявление истинного положения зависимости скорости звука от давления.

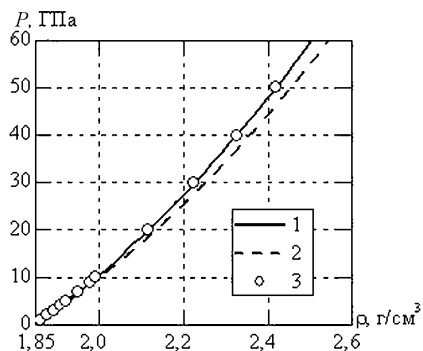


Рис. 3. Нормальные изотермы бериллия в диапазоне давлений $P = 0 \div 60$ ГПа: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – аппроксимация экспериментальных данных [26]; 3 – нормальная изотерма, рекомендованная в [27]

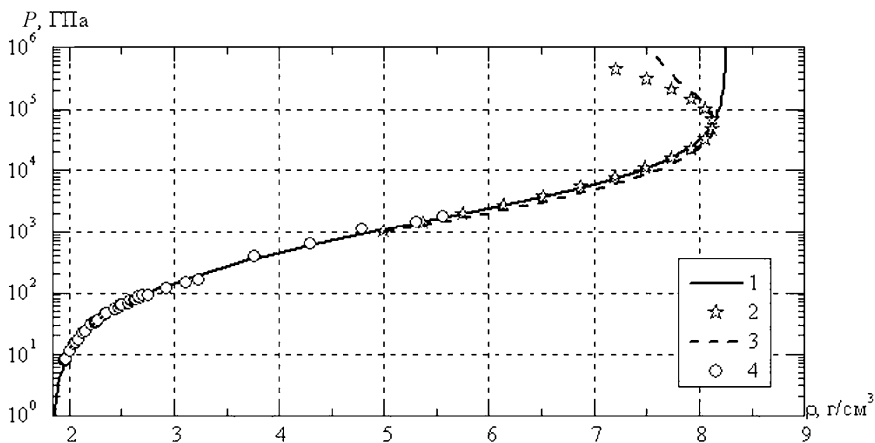


Рис. 4. Зависимость давления от плотности на ударной адиабате сплошного бериллия. Расчет по УРС: 1 – данная работа; 2 – КСМ [28]; 3 – модель ТФПК [2, 21]; экспериментальные данные: 4 – [8–12]

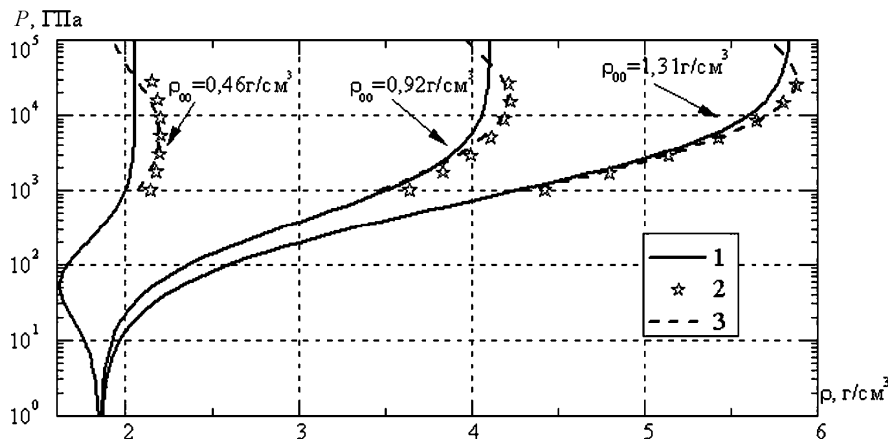


Рис. 5. Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах пористого бериллия. Расчет: 1 – УРС данной работы; 2 – КСМ [28]; 3 – модель ТФПК [2, 21]

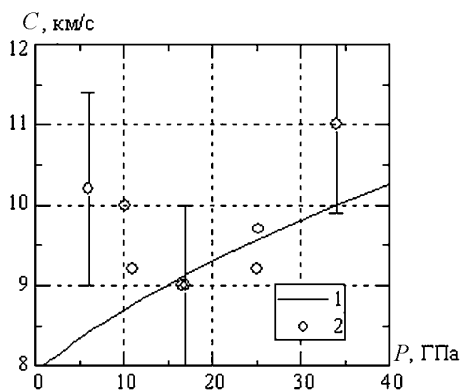


Рис. 6. Зависимость изэнтропической скорости звука от давления в ударно-сжатом сплошном бериллии: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – экспериментальные данные [29]

На рис. 7 приведены рассчитанные по УРС данной работы зависимости $T(P)$ на ударной адиабате и линии плавления. Из результатов расчетов следует, что в точке пересечения линии плавления с ударной адиабатой бериллия $P \approx 165$ ГПа, $T \approx 3000$ К. Расчеты по уравнению состояния, приведенному в [30], дают начало плавления на ударной адиабате $P=112$ ГПа, окончание $P=157$ ГПа, температура плавления $T=1900$ К. Заметим, что в [30] температура на линии плавления в широком диапазоне изменения давления практически не меняется, что является необычным и нуждается в экспериментальном подтверждении.

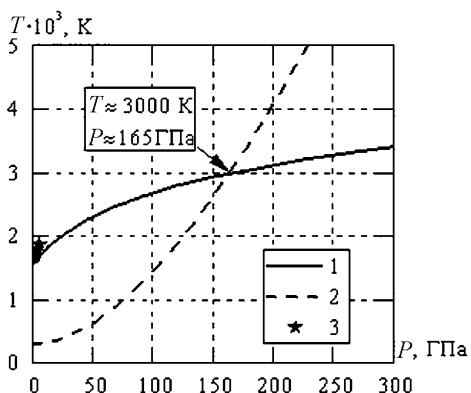


Рис. 7. Зависимости температуры от давления на ударной адиабате и на линии плавления бериллия. Расчет по УРС данной работы: 1 – на линии плавления; 2 – на ударной адиабате; 3 – экспериментальные данные на линии плавления [31]

Сравнение расчетов по УРС алюминия с экспериментальными данными и расчетами по другим моделям

На рис. 8 в координатах плотность – температура представлены расчетные и экспериментальные данные по тепловому расширению алюминия. Экспериментальные данные [22, 23] до температуры плавления алюминия хорошо описываются расчетами по УРС данной работы. На рис. 9 приведены экспериментальные данные [22] по изобарической теплоемкости и рассчитанная по УРС данной работы зависимость от тем-

пературы изобарической теплоемкости алюминия при нормальном давлении. Учитывая, что уравнение состояния настоящей работы однофазное и не описывает изменение термодинамических функций при плавлении, можно заключить, что описание в среднем расчетом по УРС экспериментальных данных для $C_p(T)$ из [22] хорошее.

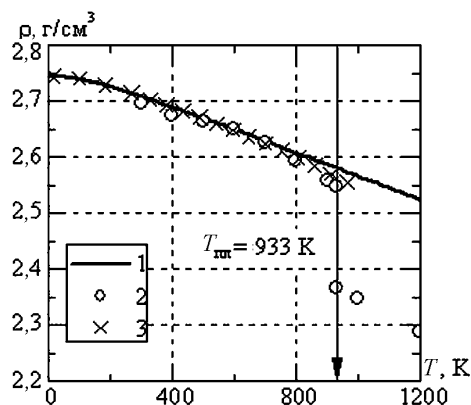


Рис. 8. Зависимость плотности алюминия от температуры при нормальном давлении: 1 – расчет по УРС данной работы; эксперимент: 2 – [22]; 3 – аппроксимация данных по тепловому расширению из [23]

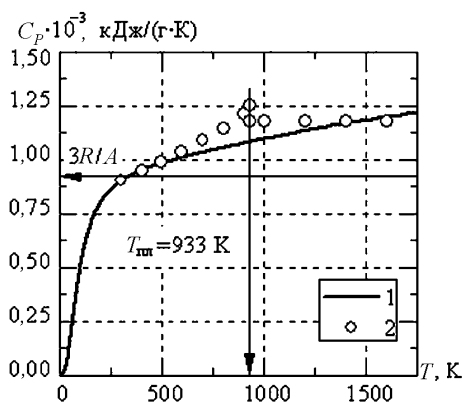


Рис. 9. Зависимость теплоемкости алюминия от температуры при нормальном давлении: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – эксперимент [22]

На рис. 10 в координатах давление – плотность представлены нормальные изотермы ($T = 293$ К): рассчитанные по УРС данной работы и рекомендованные в [27]. Для сравнения на рис. 10 приведены также нормальные изотермы, рассчитанные по УРС [32, 33]. При $\rho > \sim 6,5$ г/см³ расчет по УРС [33] отклоняется от расчетов по УРС данной работы и УРС [32]. Следует отметить, что с повышением давления нормальная изотерма, рассчитанная по УРС данной работы, асимптотически приближается к расчетам по теоретической модели ТФП [2], при $P > \sim 3 \cdot 10^4$ ГПа они практически совпадают.

На рис. 11 в координатах давление – плотность показаны ударные адиабаты сплошного алюминия, рассчитанные по УРС данной работы, КСМ [28], ТФПК [2, 21], УРС [33], там же приведены и экспериментальные

данные [9, 13–15]. В экспериментально исследованной области расчеты по УРС данной работы хорошо согласуются с экспериментальными данными, приведенными в [9, 13–15]. В области больших давлений, до плотности $\rho \sim 13,5 \text{ г/см}^3$, расчеты по УРС данной работы

согласуются с расчетами по теоретическим моделям КСМ и ТФПК. На рис. 12 показаны относительные отклонения расчетных и экспериментальных значений скорости ударной волны D от $D(U)$ зависимости, рассчитанной по УРС данной работы.

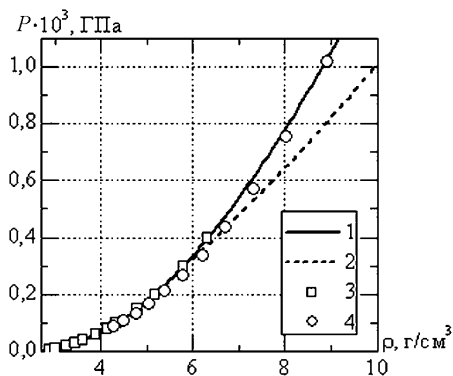


Рис. 10. Нормальные изотермы алюминия: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – расчет по УРС [33]; 3 – нормальная изотерма, рекомендованная в [27]; 4 – расчет по УРС [32]

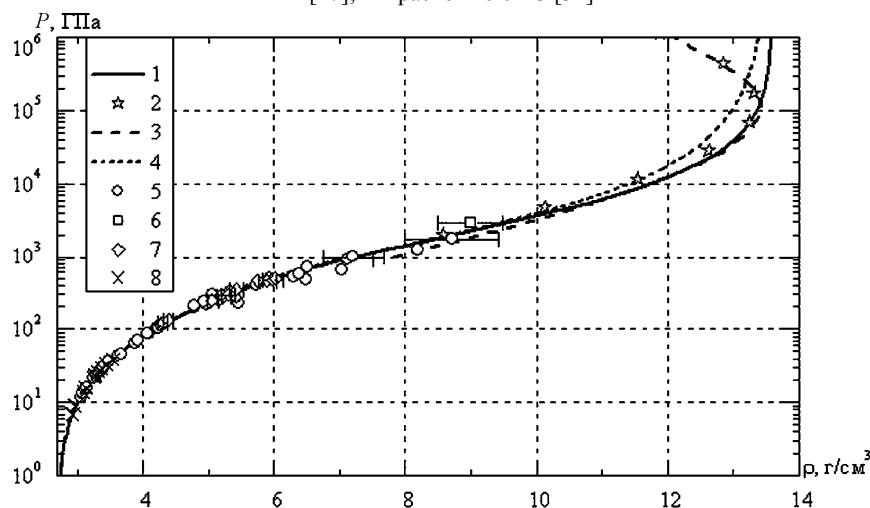


Рис. 11. Ударные адиабаты сплошного алюминия ($\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$). Расчет: 1 – УРС данной работы; 2 – КСМ [28]; 3 – модель ТФПК [2, 21]; 4 – УРС [33]. Экспериментальные данные: 5 – [13]; 6 – [14]; 7 – [15]; 8 – [9]

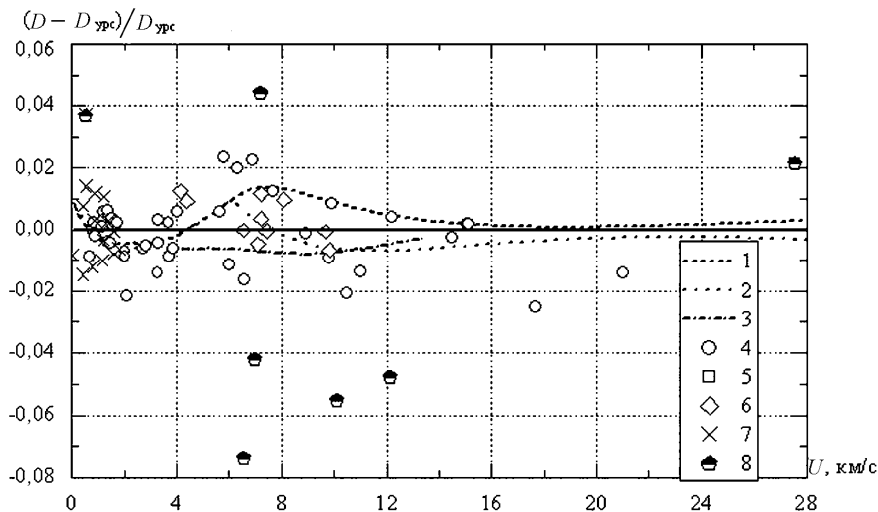


Рис. 12. Относительные отклонения расчетных и экспериментальных значений скорости ударной волны D от $D(U)$ зависимости, рассчитанной по УРС данной работы: 1 – УРС [33]; 2 – по $D(U)$ зависимости из [13]; 3 – УРС [39].

Экспериментальные данные: 4 – [13]; 5 – [14]; 6 – [15]; 7 – [9]; 8 – данные из [9], [13] и [14], не использовавшиеся при подборе параметров $D(U)$ зависимости

Рис. 13 демонстрирует положение рассчитанных по УРС данной работы ударных адиабат алюминия с начальной плотностью ρ_{00} : 1,9 г/см³; 1,31 г/см³; 0,91 г/см³; 0,34 г/см³. Только ударная адиабата, рассчитанная для плотности $\rho_{00} = 0,34$ г/см³, расходится с экспериментальными данными. Расчеты ударных адиабат для других плотностей хорошо согласуются с экспериментальными данными.

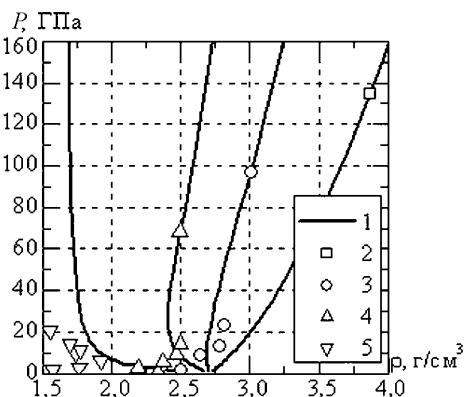


Рис. 13. Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах пористого алюминия: 1 – расчет по УРС данной работы. Эксперимент [13]: 2 – $\rho_{00} = 1,9$ г/см³; 3 – $\rho_{00} = 1,3$ г/см³; 4 – $\rho_{00} = 0,91$ г/см³; 5 – $\rho_{00} = 0,34$ г/см³

В работах [13, 34] приведены экспериментальные данные по повторному ударно-волновому сжатию сплошного алюминия. Представленные на рис. 14 рассчитанные по УРС данной работы $P(U)$ зависимости демонстрируют хорошее описание этих экспериментальных данных.

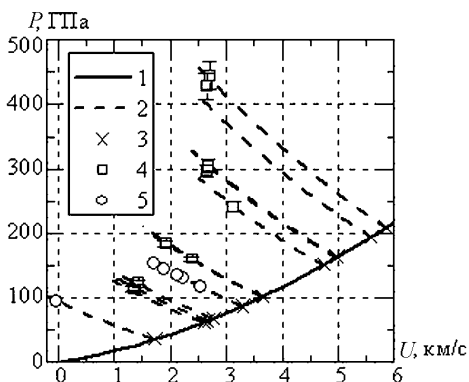


Рис. 14. Зависимости давления от массовой скорости на ударных адиабатах сплошного алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – первая ударная адиабата; 2 – адиабаты повторного сжатия. Экспериментальные данные: 3 – начальные состояния за фронтом первой ударной волны [13, 34]; состояния на ударных адиабатах повторного сжатия, 4 – [34]; 5 – [13]

Зависимости изэнтропической скорости звука в ударно-сжатом алюминии от плотности, рассчитанные по УРС данной работы и по УРС [33], приведены на рис. 15, там же даны и экспериментальные данные из [13]. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными в пределах их ошибки.

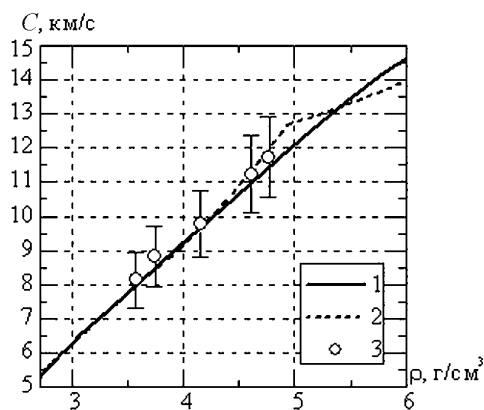


Рис. 15. Зависимость изэнтропической скорости звука в алюминии от плотности на ударной адиабате. Расчет: 1 – УРС данной работы; 2 – УРС [33]. Эксперимент: 3 – [13]

Описание экспериментальных данных [35] на изэнтропах расширения продемонстрировано на рис. 16.

Рассчитанные по УРС данной работы и УРС [33] зависимости скорости разлета ударно-сжатого сплошного алюминия в воздух от массовой скорости на ударной адиабате показаны на рис. 17. Там же приведены и экспериментальные данные из [13]. Точками *a* и *b* на рис. 17 обозначены состояния на ударной адиабате, при разгрузке из которых в воздух температура алюминия равна температуре плавления (разлет из состояния в точке *a*) и температуре кипения (разлет из состояния в точке *b*). Чем выше температура расплавленного, а затем кипящего алюминия, тем больше отклонения расчетных зависимостей от экспериментальных данных. По-видимому, это связано с особенностями разлета в воздух жидкого и кипящего (испаряющегося) алюминия и указывает на необходимость дополнения уравнения состояния алгоритмами расчета термодинамических функций в двухфазной области жидкость – пар.

На рис. 18, 19 приведены рассчитанные по УРС данной работы зависимости $T(P)$, $T(\rho)$ на ударной адиабате и линии плавления. Из результатов расчетов следует, что в точке пересечения линии плавления с ударной адиабатой алюминия $P \approx 120$ ГПа, $T \approx 4500$ К, $\rho \approx 4,35$ г/см³. На рис. 18 также приведены результаты расчетов по другим уравнениям состояния параметров плавления на ударной адиабате [32, 36, 37]. Расчеты по УРС данной работы практически совпадают с расчетами, полученными по УРС [32, 36, 37] в точке пересечения линии плавления с ударной адиабатой. Там же приведены экспериментальные данные, полученные на линии плавления, и результаты расчетов по приведенной в [38] зависимости $T(P)$, аппроксимирующей экспериментальные данные. Расчет по зависимости из [38] дает на 5–10 % большие значения температуры, чем расчеты по УРС данной работы. Аналогичные отклонения наблюдаются и в приведенной на рис. 19 зависимости $T(\rho)$. Возможно, это является следствием неточности используемой нами модели плавления, основанной на законе Линдемана.

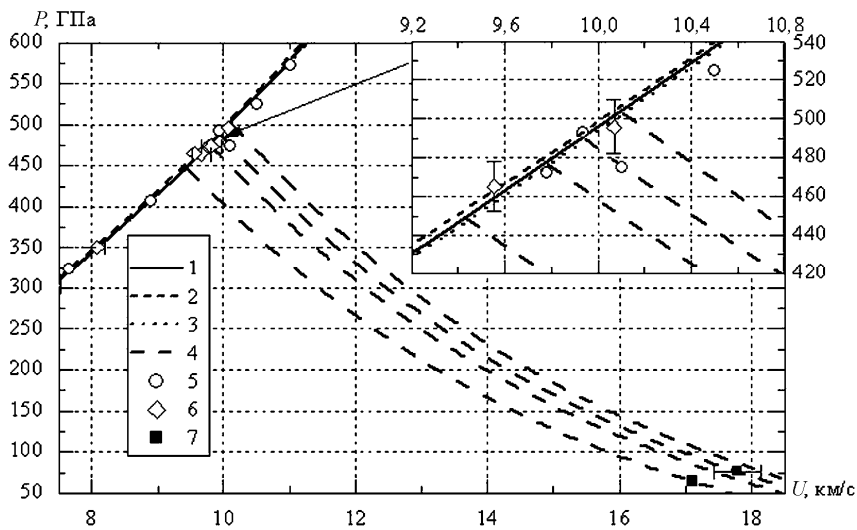


Рис. 16. Зависимости давления от массовой скорости на ударной адиабате и изэнтропах расширения алюминия. Расчет ударных адиабат: 1 – УРС данной работы; 2 – УРС [33]; 3 – по $D-U$ зависимости из [13]; 4 – расчет по УРС данной работы изэнтроп из начальных состояний на ударной адиабате $P = 489,6 \pm 13,1$ ГПа и $P = 448,86$ ГПа. Экспериментальные данные: 5, 6 – на ударной адиабате [13, 15]; 7 – на изэнтропах расширения [35]

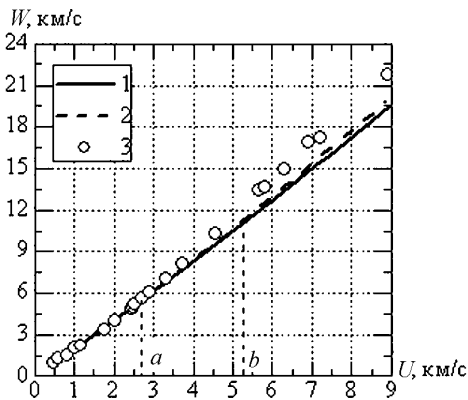


Рис. 17. Зависимости скорости разлета в воздухе от массовой скорости на ударной адиабате сплошного алюминия: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – расчет по УРС [33]; 3 – эксперимент [13]; a – состояние на ударной адиабате, при разгрузке из которого в воздух алюминий имеет температуру плавления; b – состояние на ударной адиабате, при разгрузке из которого в воздух алюминий имеет температуру кипения

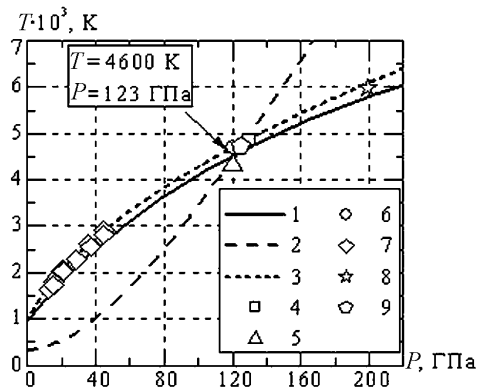


Рис. 18. Зависимости температуры от давления на ударной адиабате и линии плавления алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – на линии плавления; 2 – на ударной адиабате. Расчет по другим УРС: 4 – [36] (начало плавления); 5 – [32] (начало плавления); 6 – [37]. Расчет линии плавления по аппроксимационной зависимости из [38] – 3. Экспериментальные данные на линии плавления, приведенные в [38], – 7–9

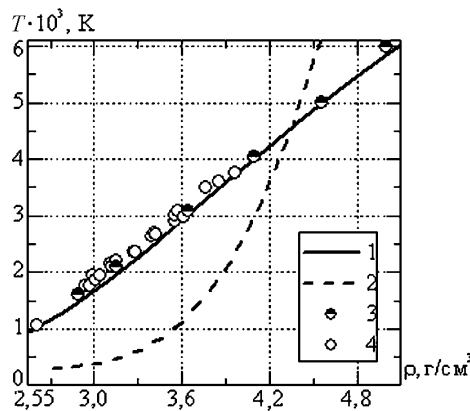


Рис. 19. Зависимости температуры от плотности на ударной адиабате и линии плавления алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – на линии плавления; 2 – на ударной адиабате. Расчетные данные на линии плавления, приведенные в [40], – 3. Экспериментальные данные на линии плавления приведенные в [40], – 4

Приведенные на рис. 1–19 результаты показывают, что использованная при разработке уравнений состояния модель позволяет описать имеющиеся экспериментальные данные для бериллия и алюминия практически во всем диапазоне, исследованном с использованием ударных волн. Уравнение состояния алюминия фактически не описывает только экспериментальные данные, полученные при исследовании ударных адиабат образцов с низкой начальной плотностью $\rho_{00} = 0,34 \text{ г/см}^3$ (при $\rho \sim 0,7\rho_0$) и экспериментальные данные по регистрации скорости разлета в воздух ударно-сжатого алюминия, температура которого выше температуры кипения.

Список литературы

1. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. К. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
2. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975.
3. Kerley G. I. User's Manual for PANDA: A Computer Code for Calculating Equations of State, Los Alamos National Laboratory report LA-8833-M (November, 1981).
4. Глушак Б. Л., Гударенко Л. Ф., Стяжкин Ю. М. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов с переменной теплоемкостью ядер и электронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 57–62.
5. Бушман А. В., Жерноклетов М. В., Ломоносов И. В., Сутулов Ю. Н., Фортов В. Е., Хищенко К. В. Экспериментальное исследование фенолона и полистирола в условиях ударного нагружения и изэнтропического расширения. Уравнение состояния пластиков при высоких плотностях энергии // ЖЭТФ. 1996. Т. 109. Вып. 5. С. 1662–1670.
6. Grover Richard. Liquid Metal Equation of State Based on Scaling. // Chemical Physics. 1971. Vol. 55, No. 7. P. 3435–3441.
7. Сапожников А. Т., Першина А. В. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов в широком диапазоне плотностей и температур // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики программы численного решения задач математической физики. 1979. Вып. 4(6). С. 47–56.
8. Van Thiel M., Shaner J. W., Salinas E. Compendium of Shock Wave Data. Livermore Lawrence Laboratory Report, OCRL 50-108. 1977. Vol. 1–3.
9. LASL Shock Hugoniot Data. University of California press. Berkeley. Los Angeles. London. 1980. P. 658.
10. Ragan C. E. III Shock compression measurements at 1 to 7 TPa // Phys. Rev Ser. A. 1982. Vol. 25, No. 6. P. 3360–3375.
11. Nellis W. J., Moriarty J. A., Michell A. C., Holmes N. C. Equation of state of beryllium at shock pressure of 0.4–1.1 TPa (4–11 Mbar) // J. Appl. Phys. 1997. Vol. 82(5). P. 2225–2227.

12. Cauble R., Perry T. S., Bach D. R., Budil K. S., Hammel B. A., Collins G. W., Gold D. M., Dunn J., Celiers P., Da Silva L. B., Foord M. E., Wallace R. J., Stewart R. E., Woosley N. C. Absolute Equation-of-State Data in the 10–40 Mbar (1–4 TPa) Regime // Phys. Rev. Letters, 1998, Vol. 80, No. 6. P. 1248–1251.
13. Трунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Симаков Г. В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001.
14. Ragan III C. E. Shock-wave experiments at three-fold compression // Phys. Rev. A. 1984. Vol. 29, No. 3. P. 1391–1402.
15. Knudson M. D., Lemke R. W., Hayes D. B., Hall C. A., Deeney C., Asay J. R. Near-Absolute Hugoniot measurements in aluminum to 500 GPa using a magnetically accelerated flyer technique // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 94, No. 7. P. 4420–4431.
16. Karl A. Gschneider. Physical Properties and Interrelationships of Metallic and Semimetallic Elements // Solid State Physics. 1964. Vol. 16. P. 275–426.
17. Бушман А. В., Фортов В. Е., Модели уравнений состояния веществ // УФН. 1983. Т. 140. Вып. 2. С. 177–232.
18. Кормер С. Б., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Колесникова А. Н. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. Вып. 3. С. 686–702.
19. Альтшулер Л. В., Бушман А. В., Жерноклетов М. В., Зубарев В. Н., Леонтьев А. А., Фортов В. Е. Изэнтропы разгрузки и уравнение состояния металлов при высоких плотностях энергии. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. Вып. 2. С. 741–760.
20. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
21. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества: Препринт № 59. М.: ИПМ АН СССР, 1978.
22. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989.
23. Новикова С. И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974.
24. Чиркин В. С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат, 1968.
25. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник / Под ред. В. П. Глушко. М.: Наука, 1981.
26. Velisavljevic N., Chesnut G. N., Vohra Y. K. Structural and electrical properties of beryllium metal to 66 GPa studied using designer diamond anvils // Phys. Rev Ser. B. 2002. Vol. 65. P. 172107-1–172107-4
27. Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е., Кузьменков Е. А. Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов // ПТМФ. 1987. № 1.

28. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Квантово-статистические адиабаты пористых веществ // Математическое моделирование. 1998. Т. 10, № 7. С. 111–123.
29. Chabildas L. C., Wise J. L., Asay J. R. Reshock and Release Behavior of Beryllium // in Proceedings of the Inter. Conf. "Shock Waves in Condensed Matter-1981", Eds. W. J. Nellis, L. Seaman, R. A. Graham. American Institute of Physics. 1982. P. 422–426.
30. Kerley G. I. Equations of State for Be, Ni, W, and Au, Sandia report SAND 2003-3784 (October, 2003).
31. Тонков Е. Ю. Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. М.: Наука, 1979.
32. Nellis W. K., Moriarty J. A., Mitchell A. C., Ross M., Dandrea R. G., Ashcroft N. W., Holmes N. C., Gathers G. R. Metals Physics at Ultrahigh Pressure: Aluminium, Copper, and Lead as Prototypes // Physical Review letters. 1998. Vol. 60, No. 14. P. 1414–1417.
33. Глушак Б. Л., Гударенко Л. Ф., Стяжкин Ю. М., Жеребцов В. А. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов с переменной электронной теплоемкостью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 1. С. 32–37.
34. W. J. Nellis, A. C. Mitchell, D. A. Young. Equation-of-state measurements for aluminium, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar) // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 93, No. 1. P. 304–310.
35. Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E., Hall C. A., Asay J. R. Equation of state measurements in Liquid deuterium to 70 GPa // Physical Review letters. 2001. Vol. 87, No. 22.
36. Chengda Dai, Hua Tan, Huayun Geng. Model for assessing the melting on Hugoniot of Metals: Al, Pb, Cu, Mo, Fe, and U // Journal of Applied Physics. 2002. Vol. 92, No. 9. P. 5019–5026.
37. Медведев А. Б. Модификация модели Ван-дер-Ваальса для плотных состояний // Ударные волны и экстремальные состояния вещества // Под ред. В. Е. Фортובה, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. М.: Наука, 2000. С. 315–341.
38. Chisolm E. D., Scott D. C., Duane C. W. Test of theoretical equation of state for elemental solids and liquids // Phys. Rev Ser. B. 2003. Vol. 68. P. 104103-1-104103-12.
39. Урлин В. Д. Плавление при сверхвысоких давлениях, полученных в ударной волне // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. Вып. 2(8). С. 485–492.
40. Burakovsky L., Greeff C. W., Preston D. L., Analytic model of the shear modulus at all temperatures and densities // Phys. Rev Ser. B. 2003. Vol. 67. P. 094107-1-094107-9.

Статья поступила в редакцию 11.04.2005.