

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ МЕТАЛЛОВ С ЭФФЕКТИВНЫМ УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ. ЧАСТЬ 2. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ

Д. Г. Гордеев, Л. Ф. Гударенко, А. А. Каякин, В. Г. Куделькин

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, Россия, г. Саров Нижегородской обл.
E-mail: Gud@vniief.ru

Представлены результаты расчетов по уравнению состояния Al, разработанному с использованием модели, описанной в части 1 (см. наст. вып., с. 19–25). На примере описания разработанным уравнением состояния экспериментальных и расчетных данных, характеризующих термодинамические свойства этого металла, продемонстрирована область применимости модели. Представлены также результаты сравнения расчетов по разработанному уравнению состояния с расчетами по другим моделям: Томаса – Ферми с поправками Киржница – Калиткина; Томаса – Ферми – Дирака; Томаса – Ферми – Дирака – Вайзекера, Саха и др.

Алюминий является металлом, для которого к настоящему времени опубликовано большое число работ с результатами исследования его термодинамических свойств экспериментальными и расчетными методами. Это позволяет наиболее полно использовать существующие возможности для проверки адекватности разрабатываемых уравнений состояния (УРС). В данной работе на примере создания уравнения состояния алюминия продемонстрированы возможности модели, описанной в [1]. Значения параметров, используемых в УРС, определены из условия описания экспериментальных данных и результатов расчетов по различным моделям, характеризующим термодинамические свойства алюминия.

При выборе зависимости $P_x(\rho)$ для УРС авторы ориентировались на следующие данные. В диапазоне $2,7 < \rho < \sim 6$ г/см³ аппроксимировались результаты экспериментов по исследованию нормальной изотермы алюминия, приведенные в работах [2–4], и расчетные оценки этой зависимости, приведенные в работе [5]. В диапазоне $8 < \rho < \sim 40$ г/см³ аппроксимировались результаты современных расчетов нулевой изотермы алюминия [6], выполненные методом функционала плотности. При $\rho \sim > 40$ г/см³ выбор параметров зависимости $P_x(\rho)$ проводился с условием описания этой зависимостью нулевой изотермы, рассчитанной по модели Томаса – Ферми с поправками Д. А. Киржница, Н. Н. Калиткина (модель ТФП) [7].

При подборе параметров тепловых составляющих $P_e(\delta, T)$, $E_e(\delta, T)$, учитывающих вклад электронов в области больших давлений ($P > \sim 2 \cdot 10^4 \div 3 \cdot 10^4$ ГПа)

и температур ($T > \sim 20$ эВ), использовались результаты расчетов теплового вклада электронов, полученные по модели ТФП [7]. В этой области состояний мало информации для определения параметров составляющих $P_p(\delta, T)$, $E_p(\delta, T)$, учитывающих вклад ядер. При подборе параметров для $P_p(\delta, T)$, $E_p(\delta, T)$ использовалась приведенная в работе [8] зависимость коэффициента Грюнайзена ядер от плотности, полученная в расчетах по теоретической модели.

В области $P < \sim 2 \cdot 10^4 \div 3 \cdot 10^4$ ГПа и $T < \sim 20$ эВ параметры составляющих уравнения состояния, учитывающих вклад электронов $P_e(\delta, T)$, $E_e(\delta, T)$ и ядер $P_p(\delta, T)$, $E_p(\delta, T)$, подбирались при условии описания уравнением состояния имеющихся в этой области экспериментальных и расчетных данных, характеризующих термодинамические свойства алюминия. В частности, использовались результаты экспериментов по исследованию ударных адиабат сплошных и пористых образцов, исследованию скорости звука и изэнтроп расширения ударно сжатых веществ, экспериментальные данные по тепловому расширению, положению «линий» плавления, теплоемкости и др. Использовались также результаты оценок положения критической точки двухфазной области жидкость–пар, точки кипения, расчеты состояний на ударной адиабате, полученные по современным моделям, в частности, методом функционала плотности.

Начальные приближения для части параметров определены по справочным данным и с использованием оценок по теоретическим моделям.

Для потенциальных составляющих в $0 \leq \delta < 1$ подобраны параметры m и l (см. зависимости (4), (5) в работе [1], для энергии связи $Q_{св}$ принято справочное значение).

Параметры для потенциальных составляющих в диапазоне $1 \leq \delta < \delta_c$ на этапе подбора параметров УРС не варьировались. Вклад потенциальных составляющих рассчитывался по табличным зависимостям $P_{x_k}(\delta_k)$ и $E_{x_k}(\delta_k)$, полученным с использованием заданной $D(U)$ зависимости для ударной адиабаты и тепловых составляющих УРС.

В диапазоне $\delta > \delta_c$ в потенциальных составляющих варьировался используемый в интерполяционной функции $Y(\delta)$ параметр α (см. (17) в работе [1]), определяющий «скорость приближения» потенциального давления к значениям, рассчитанным по теоретической модели УРС в области больших плотностей.

В составляющих, учитывающих тепловой вклад ядер, варьировались четыре параметра функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ (см. в работе [1] формулу (21)), параметр α_Γ интерполяционной функции $Y_\Gamma(\delta)$ и параметр δ_p . Значения остальных параметров решеточных составляющих с достаточной точностью были оценены по справочным данным и с использованием расчетов по другим моделям.

Выражение для учета вклада электронов $F_e(\delta, T)$ [1] содержит 14 подгоночных параметров ($\beta_0, \psi_1, \psi_2, a_\psi, b_\psi, \alpha_1, \alpha_2, a_\zeta, b_\zeta, c_\zeta, Z_a, Z_b, a_e, \delta_{ne}$), из них 13 – параметры функции $y(\delta, T)$.

Проверка описания части экспериментальных и расчетных данных проводилась после подбора параметров УРС. Это позволило оценить возможность предсказания моделью (уравнением состояния) свойств веществ в неисследованных областях. В работе [1] описана технология подбора параметров, в которой предусматривается использование ударной адиабаты сплошного вещества как опорной зависимости. Такая технология позволяет уменьшить число подбираемых параметров УРС, что заметно упрощает процедуру их подбора.

При выполнении данной работы рассмотрены варианты аппроксимации экспериментальных данных на ударных адиабатах алюминия аналитическими зависимостями, приведенными в работах [9–13]. Анализ вариантов аппроксимации показал, что в среднем при массовой скорости за фронтом ударной волны $U \leq \approx 28$ км/с лучшее описание экспериментальных данных по исследованию ударной адиабаты сплошного алюминия [11, 14–17] достигается видом зависимости скорости фронта ударной волны D от массовой скорости за фронтом U , используемой в работах [9, 10],

$$D(U) = C_1 + C_2 U + \frac{C_3 U}{U + C_4} + C_5 \sin \left[C_6 + C_7 \left(1 - e^{-C_8 U} \right) \right]$$

с параметрами: $C_1 = 5,2$ км/с, $C_2 = 1,183$ (ед), $C_3 =$

$= 1,83$ км/с, $C_4 = 4,535$ км/с, $C_5 = 0,097$ км/с, $C_6 =$

$= 1,794$ (ед), $C_7 = 9,384$ (ед), $C_8 = 0,161$ км/с. Отсюда следует значение скорости звука в алюминии при нормальных условиях: $D(U = 0) = 5,295$ км/с.

Параметры $D(U)$ зависимости подобраны по экспериментальным данным [11, 14–17]. В уравнении состояния она использовалась до $U \leq \approx 21$ км/с.

На рис. 1 проведено сравнение с экспериментальными данными работ [11, 14–19] зависимостей разности скорости фронта ударной волны и массовой скорости за фронтом ($D-U$) от массовой скорости U , рассчитанных по УРС данной работы. Показано, что в диапазоне $0 < U < 28$ км/с расчеты по УРС данной работы в среднем хорошо описывают имеющиеся экспериментальные данные.

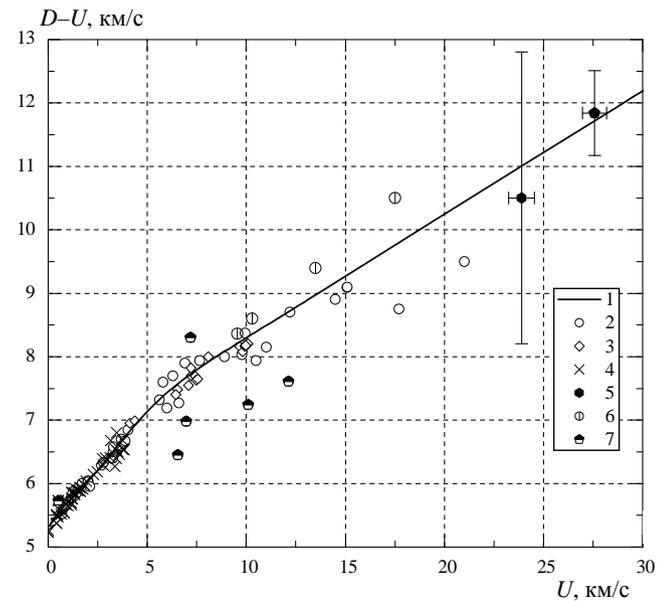


Рис. 1. Зависимость разности скорости фронта ударной волны и массовой скорости от массовой скорости для сплошного алюминия. Расчет: 1 – по УРС данной работы; экспериментальные данные: 2 – [11]; 3 – [15, 17]; 4 – [14]; 5 – [16, 19]; 6 – [18]; 7 – данные из [11, 14], не использовавшиеся при подборе параметров $D(U)$ зависимости

На рис. 2,а и 2,б в координатах давление – плотность показаны ударные адиабаты сплошного алюминия, рассчитанные по УРС данной работы, по моделям Purgatorio [20], EOSTA [21], QEOS [22], ТФПК* [7, 23], ТФ [7] с учетом вклада ядер по [23], методам молекулярной динамики (МД) и функционала плотности (МФП) [24]. Там же приведены и экспериментальные данные работ [11, 14–18, 25–27]. В экспериментально исследованной области (см. рис. 2,а) расчеты по УРС данной работы хорошо согласуются с экспериментальными данными, приведенными в работах [11, 14–17].

* Модель ТФП [7], дополненная моделью Копышева В. П. для учета вклада ядер [23].

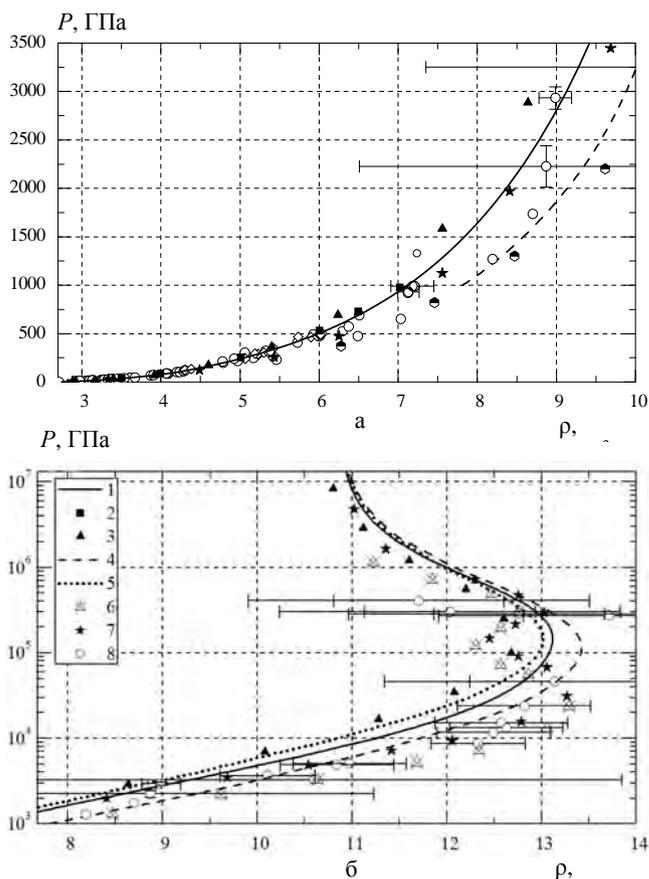


Рис. 2. Ударные адиабаты сплошного алюминия ($\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$). Расчет по: 1 – УРС данной работы; 2 – методом МД + МФП [24]; 3 – QEOS [22]; 4 – ТФПК [7, 23]; 5 – ТФ [7] с учетом вклада ядер [23]; 6 – EOSTA [21]; 7 – Purgatorio [20]; экспериментальные данные: 8 – [11, 14–19, 25–27]

В области больших давлений и плотностей ударная адиабата, рассчитанная по УРС данной работы в плоскости давление – плотность, находится между расчетами по модели ТФПК [7, 23] и модели ТФ [7] с учетом вклада ядер по [23]. Более «жесткое» положение ударной адиабаты, рассчитанной по УРС данной работы, по сравнению с ударной адиабатой, рассчитанной по модели ТФПК [7, 23], обусловлено тремя причинами:

1. Зависимость потенциального давления от плотности в данном УРС до плотности примерно 40 г/см^3 построена с учетом результатов расчетов методом функционала плотности [6, 32] и расчетов по модели Хартри [28]. Эти расчеты дают более жесткое положение зависимости $P_x(\rho)$, чем расчеты по модели ТФПК (см. рис. 4).

2. При определении зависимости для коэффициента Грюнайзена ядер $\Gamma_{\rho 0}(\delta)$ при $T \cong 0$ при плотности больше примерно $3\rho_0$ были учтены результаты расчетов, приведенные в работе [8]. Расчеты авторов [8] дают большие значения $\Gamma_{\rho 0}$, чем расчеты по модели ТФПК.

3. Положение ударной адиабаты при плотности примерно $3\rho_0$ связано с положением экспериментальных данных работ [16, 19].

На рис. 3 в координатах давление – плотность приведены результаты расчетов нормальной ($T = 293 \text{ К}$) изотермы алюминия, выполненные по УРС данной работы, УРС работы [29] и по рекомендованной в работе [5] зависимости. Там же приведены и экспериментальные данные работ [2–4]. Заметим, что в работе [2] представлены результаты экспериментов для Al с плотностью $\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$, полученного из порошка. В среднем расчеты нормальной изотермы по УРС данной работы описывают экспериментальные данные работ [2–4], расчеты по УРС работы [29] и нормальную изотерму, рекомендованную в работе [5].

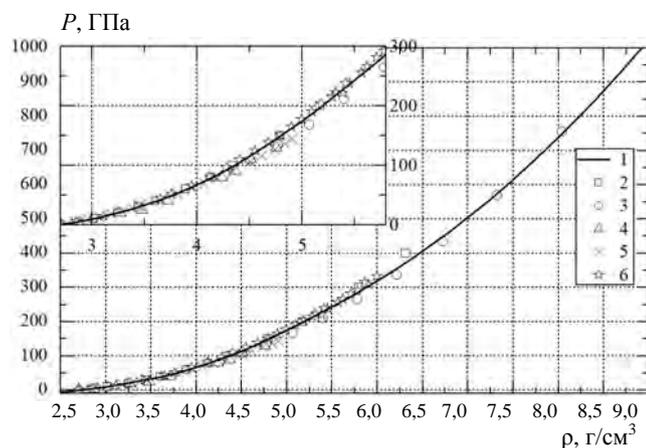


Рис. 3. Нормальная изотерма алюминия. Расчет по: 1 – УРС данной работы; 2 – [5]; 3 – УРС [29]; эксперимент: 4 – [2]; 5 – [3]; 6 – [4]

В тех же координатах на рис. 4 приведены результаты расчетов нулевой ($T = 0$) изотермы алюминия, выполненных по УРС данной работы, по модели ТФП работы [7], по модели Хартри работы [28] (данные предоставлены А. И. Воропиновым), а также результаты расчетов, полученных методом функционала плотности (МФП) [6]. На рис. 4 также приведены взятые из работ [30, 31] расчеты P_x , выполненные при $\rho = 10\rho_0$ по двум вариантам реализации моделей Томаса – Ферми (ТФ), Томаса – Ферми – Дирака (ТФД), Томаса – Ферми – Дирака – Вайзекера (ТФДВ) (см. табл. 1). Результаты этих расчетов по моделям ТФ, ТФД, ТФДВ дополнены расчетами по реализованной нами программе расчета по моделям ТФ, ТФПК [7, 23] (см. также табл. 1). Из представленных на рис. 4 результатов следует, что в диапазоне $1,5 \rho_0 < \rho < \sim 12 \rho_0$ расчеты по УРС данной работы хорошо согласуются с расчетами по модели Хартри [28], с расчетами, выполненными методом функционала плотности [6, 32], и при $\rho = 10 \rho_0$ наиболее близки к расчетам по модели ТФД [31]. При более высоких плотностях зависимость $P_x(\rho)$, рассчитанная по УРС данной работы, приближается к расчетам по модели ТФП [7].

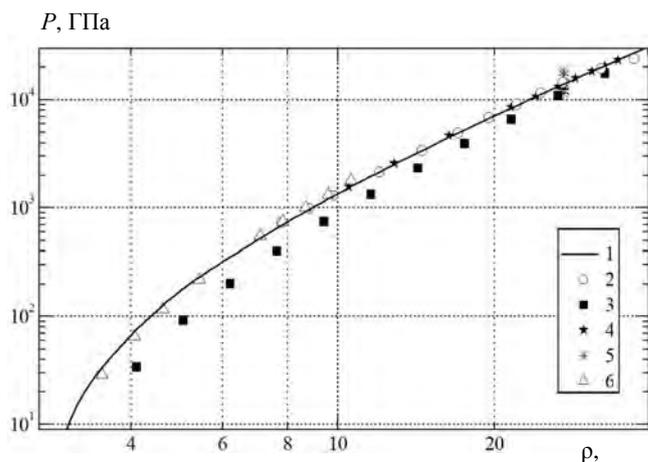


Рис. 4. Нулевые изотермы алюминия. Расчет по: 1 – УРС данной работы; 2 – модели Хартри [28]; 3 – модели ТФП [7]; 4 – методу функционала плотности [6]; 5 – данным [30, 31] (см. табл. 1); 6 – методу функционала плотности [32]

Таблица 1

Результаты расчета потенциального давления ($T = 0$) в алюминии при $\rho = 10 \rho_0$, выполненные по модели Томаса – Ферми и ее модификациям (данные получены по разным вариантам реализации моделей)

ТФ [30]	ТФ [31]	ТФ [7]	ТФД [30]	ТФД [31]	ТФДВ [30]	ТФДВ [31]	ТФП [7]	УРС данной работы
17100	18320	17190	12620	13590	11570	12490	11440	13980

На рис. 5 в координатах давление – плотность показано положение ударных адиабат пористого алюминия с начальной плотностью ρ_{00} , г/см³: 1,9; 1,6; 1,31; 0,91; 0,34. Расчеты выполнены по УРС данной работы, модели Саха [33], модели ТФПК [7, 23], модели ТФ с учетом вклада ядер [7, 23]. На рисунках также приведены экспериментальные данные [11, 34–36]. Сравнение представленных на рис. 5,а и 5,б результатов расчетов и экспериментальных данных показывает, что расчеты по УРС данной работы хорошо согласуются с экспериментальными данными. В области $P > 100$ Мбар наши расчеты находятся между расчетами по моделям ТФПК и ТФ с учетом вклада ядер, асимптотически приближаясь к этим расчетам и расчетам по модели Саха [33] при $P \rightarrow \infty$.

На рис. 6 приведены зависимости давления от массовой скорости для алюминия на основной ударной адиабате, повторных ударных адиабатах и изэнтропах расширения в сравнении с экспериментальными данными. Везде наблюдается хорошее согласие с экспериментальными данными.

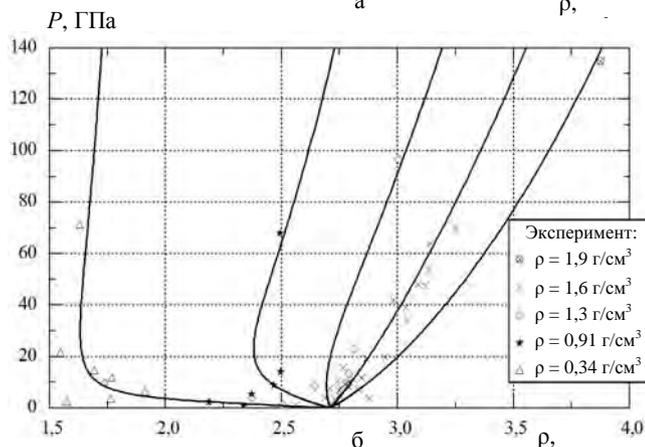
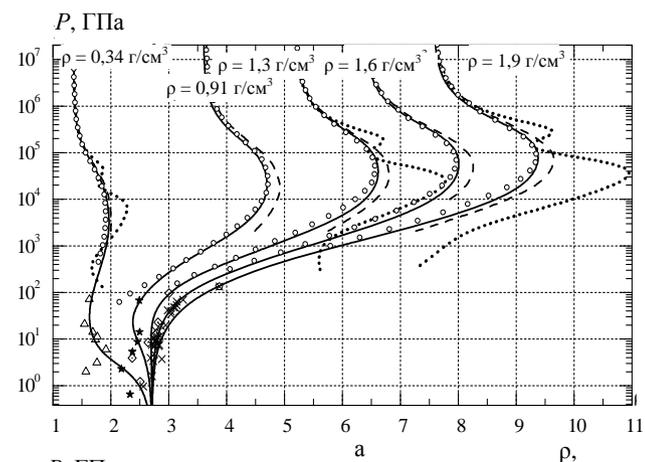


Рис. 5. Зависимость давления от плотности на ударных адиабатах пористого алюминия. Расчет: сплошные линии – УРС данной работы; пунктирные – ТФПК [7, 23]; точки – модель Саха [33]; круги – модель ТФ [7] с учетом вклада ядер [23]; эксперимент: [11, 34–36]

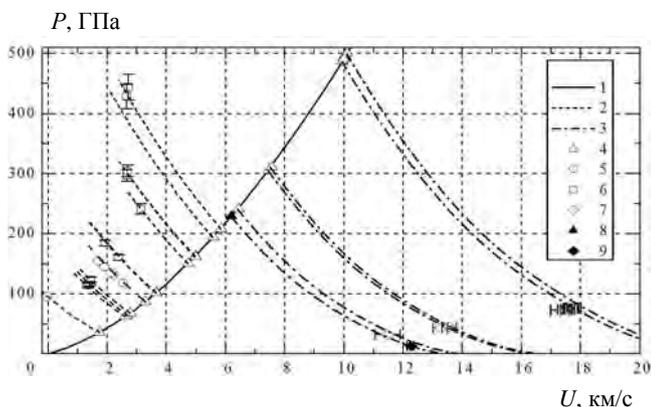


Рис. 6. Зависимость давления от массовой скорости на ударных адиабатах и изэнтропах расширения сплошного алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – ударная адиабата; 2 – ударные адиабаты повторного сжатия; 3 – изэнтропы расширения; экспериментальные данные: 4 – начальные состояния за фронтом первой ударной волны для повторных адиабат и изэнтроп расширения [11, 15, 54]; 5, 6 – состояния на ударных адиабатах повторного сжатия [11, 54]; 7 – состояния на изэнтропах расширения [15]; 8, 9 – состояния на ударной адиабате и на изэнтропе расширения, приведенные в [9, 10]

Зависимость скорости звука от давления в ударно сжатом сплошном алюминии ($\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$), рассчитанная по УРС данной работы, приведена на рис. 7. Там же даны и экспериментальные данные, приведенные в работах [11, 14, 37] для продольной и объемной скоростей звука. Результаты расчетов объемной скорости звука по УРС данной работы хорошо согласуются с экспериментальными данными. Зафиксированное в экспериментах [37] характерное уменьшение продольной скорости звука в начале плавления хорошо согласуется с рассчитанным по УРС данной работы давлением в начале плавления на ударной адиабате.

Рассчитанная по УРС данной работы зависимость скорости разлета W ударно сжатого сплошного алюминия в воздух от массовой скорости U на ударной адиабате показана на рис. 8. Там же приведены и экспериментальные данные из работы [11]. Точками a и b на рис. 8 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). Результаты расчетов по УРС данной работы согласуются с результатами экспериментов. Повысить точность описания экспериментальных данных в диапазоне $5 < \sim U < \sim 7 \text{ км/с}$, по-видимому, позволит учет изменения термодинамических функций при плавлении.

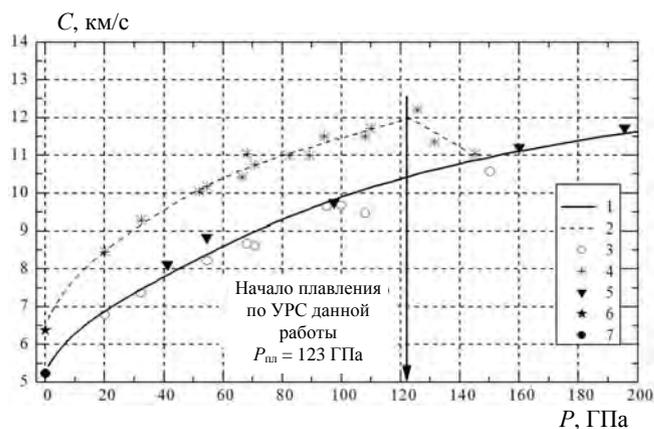


Рис. 7. Зависимость скорости звука от давления за фронтом ударной волны в алюминии $\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$. Расчет: 1 – УРС данной работы объемной скорости звука; 2 – аппроксимация продольной скорости звука; эксперимент: 3 – [37] (объемная); 4 – [37] (продольная); 5 – [11] (объемная); 6 – [14] (продольная); 7 – [14] (объемная)

На рис. 9 в координатах давление – плотность показаны зависимости потенциального давления, изэнтроп расширения и положение границы двухфазной области жидкость – пар алюминия, рассчитанных по УРС данной работы. Там же показаны приведенные в работах [38–40] положения критической точки, полученные другими авторами. В области отрицательных давлений приведен расчет зависимости $P_x(\rho)$ по МФП [41]. Зависимость $P_x(\rho)$ из работы [41] при $\rho < \sim 2,25$ заметно отличается от зависимости, используемой

в УРС данной работы, подобранной из условия лучшего описания нашей моделью экспериментальных данных и других расчетных данных при $\rho < \rho_0$. Параметры критической точки, рассчитанные по УРС данной работы, согласуются со средними значениями этих параметров, полученными разными авторами. В табл. 2 представлены более полные данные о параметрах критической точки и точки кипения алюминия.

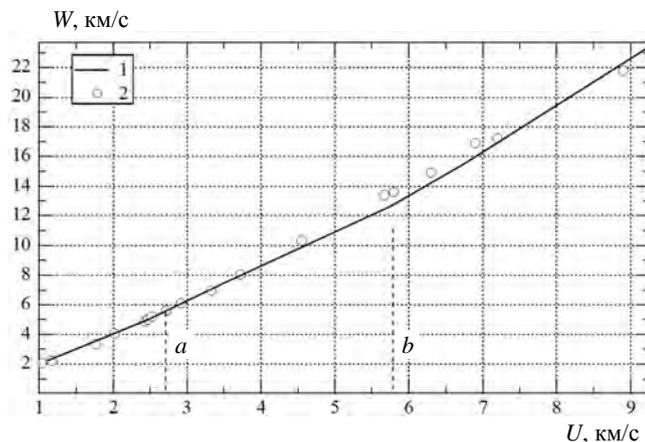


Рис. 8. Зависимость скорости разлета в воздух от массовой скорости на ударной адиабате сплошного алюминия. Расчет по УРС: 1 – данной работы; 2 – эксперимент [11]; a – состояние на ударной адиабате, при разгрузке из которого в воздух алюминий имеет температуру плавления; b – состояние на ударной адиабате, при разгрузке из которого в воздух алюминий имеет температуру кипения

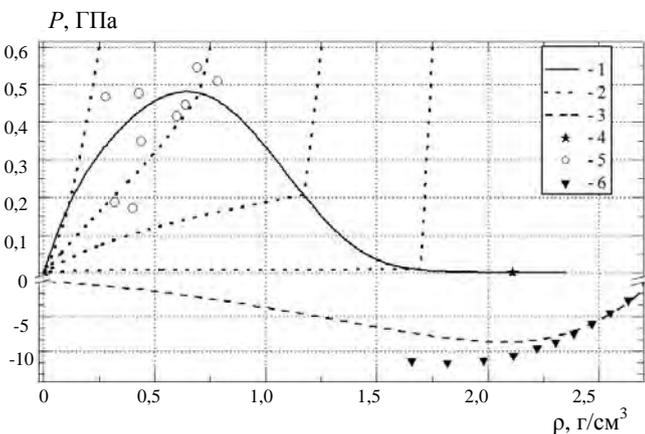


Рис. 9. Зависимость от плотности потенциального и полного давления на границе двухфазной области жидкость – пар, на изэнтропах, проходящих через двухфазную область: 1 – граница двухфазной области; 2 – изэнтропы расширения; 3 – потенциальное давление; 4 – точка кипения по УРС данной работы; 5 – данные разных авторов по оценке положения критической точки алюминия [38–40]; 6 – расчет потенциального давления по МФП [41]

На рис. 10, 11 приведены рассчитанные по УРС данной работы зависимости температуры от давления $T(P)$ и температуры от плотности $T(\rho)$ на ударной адиабате и линии плавления. Там же приведены взятые из работ [42, 43] экспериментальные данные и результаты

расчетов по модели ТФПК [7, 23], в которой положение линии плавления рассчитывается с использованием модели однокомпонентной плазмы ядер [44, 45]. Приведены также результаты расчета температуры на ударной адиабате с использованием метода молекулярной динамики (МД) и МФП [24]. Расчеты по УРС данной работы хорошо описывают экспериментальные данные, приведенные в [42, 43], и результаты расчетов методами МД, МФП и по модели ТФПК. Из расчетов по УРС данной работы следует, что в точке пересечения линии плавления с ударной адиабатой алюминия $P \approx 121$ ГПа, $T \approx 4673$ К, $\rho \approx 4,34$ г/см³.

На рис. 12 в координатах плотность – температура представлены рассчитанные по УРС данной работы зависимости плотности и изобарной теплоемкости алюминия от температуры при атмосферном давлении. Экспериментальные данные [51, 52] по тепловому расширению до температуры плавления алюминия хорошо описываются УРС данной работы. В среднем описание расчетом по УРС экспериментальных данных для $C_p(T)$ из [51, 53] хорошее.

На рис. 13 приведены зависимости давления от внутренней энергии на изохорах ρ , г/см³ = 1,4; 1; 0,675; 0,5; 0,3; 0,1, рассчитанные по УРС данной работы и УРС РОСА-М [9, 10], расчеты по модели Purgatorio, взятые из работы [20], а также экспериментальные данные, приведенные в работах [20, 48]. Расчеты по УРС данной работы удовлетворительно согласуются с результатами экспериментов.

На рис. 14 представлены результаты расчетов приведенных тепловых электронных зависимостей P_e/T^2 и E_e/T^2 от температуры в диапазоне $5 < T < 50$ эВ на изо-

хоре $\rho = \rho_0$. Расчеты выполнены по УРС данной работы, по моделям ТФ и ТФП [7] и расчеты по моделям ТФ, ТФД, ТФДВ, взятые из работ [30, 31]. В диапазоне $10 < T < 50$ эВ расчеты по УРС данной работы близки к расчетам по моделям ТФП, ТФД, ТФДВ.

На рис. 15 показаны зависимости изохорной теплоемкости $C_V(T)$ алюминия для пяти изохор, рассчитанные по УРС данной работы и модели ТФПК [7, 23]. При температурах выше 10 эВ расчеты по УРС данной работы и ТФПК [7, 23] дают близкие результаты. Вид зависимостей $C_V(T)$, характерный для статистических моделей теоретических УРС с усредненным описанием электронных оболочек без детального учета их структуры, пренебрегается флуктуациями плотности электронов. Разрывы на зависимостях $C_V(T)$, рассчитанных по модели ТФПК [7, 23] на изохорах $\delta = 10$ и $\delta = 100$, связаны с реализацией в этой модели фазового перехода твердое тело – жидкость.

Приведенные на рис. 1–15 результаты расчетов показывают, что представленное уравнение состояния, разработанное с использованием модели, описанной в работе [1], позволяет в среднем описать имеющиеся экспериментальные данные для алюминия во всей экспериментально исследованной области, а также расчеты по статистическим моделям типа модели Томаса – Ферми. Это позволяет сделать вывод о том, что модель, представленная в работе [1], может быть использована для разработки уравнений состояния, описывающих термодинамические свойства металлов в широкой области состояний.

Таблица 2

Параметры критической точки и точки кипения алюминия

Параметры точки кипения		Параметры критической точки			
Температура $T_{\text{кип}}$, К	Плотность $\rho_{\text{кип}}$	Плотность $\rho_{\text{кр}}$	Температура $T_{\text{кр}}$, К	Давление $P_{\text{кр}}$, ГПа	Энтропия $S_{\text{кр}}$, кДж/(г·град)
	г/см ³				
Данные из разных источников					
2333 [46] 2740 [47] 2793 [49] 2593 ± 50 [50]	–	0,4027 [39]	4744 [39] 8550 [39] 7400 [39] 7740 [39] 7151 [39] 8480 [39] 8000 [40] 8860 [38] 8944 [38] 8472 [38] 5700 [38] 7963 [38]	0,1717 [39] 0,4154 [39] 0,5458 [39] 0,447 [40] 0,468 [38] 0,4766 [38] 0,5094 [38] 0,187 [38] 0,35 [38]	0,005205 [40]
Расчет по УРС данной работы					
2600	2,105	0,645	8261	0,482	0,00512

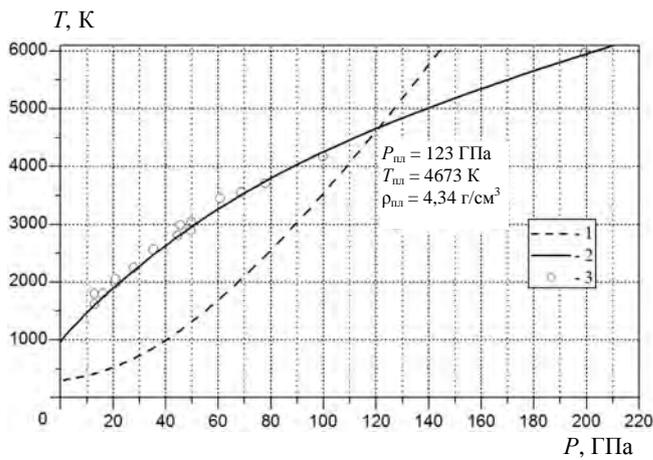


Рис. 10. Зависимость температуры от давления на ударной адиабате и на линии плавления алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – ударная адиабата сплошного образца; 2 – линия плавления; 3 – эксперимент, приведенный в [42, 43]

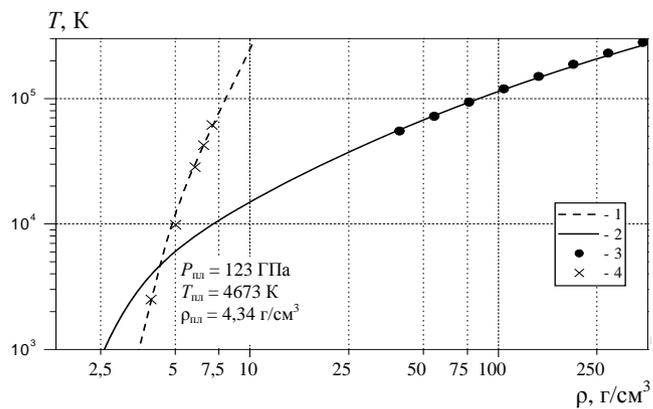


Рис. 11. Зависимость температуры от плотности на линии плавления и ударной адиабате алюминия. Расчет: 1 – ударная адиабата сплошного образца по УРС данной работы; 2 – линия плавления по УРС данной работы; 3 – линия плавления в модели ТФПК [7, 23]; 4 – ударная адиабата сплошного образца по МФП [24]

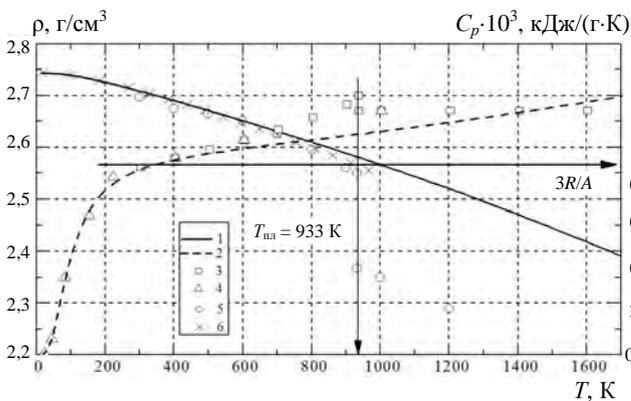


Рис. 12. Зависимость плотности и теплоемкости алюминия от температуры при нормальном давлении. Расчет по УРС данной работы: 1 – тепловое расширение; 2 – теплоемкость; эксперимент: 3, 4 – теплоемкость [51, 53]; 5 – тепловое расширение [51]; 6 – аппроксимация данных по тепловому расширению из [52]

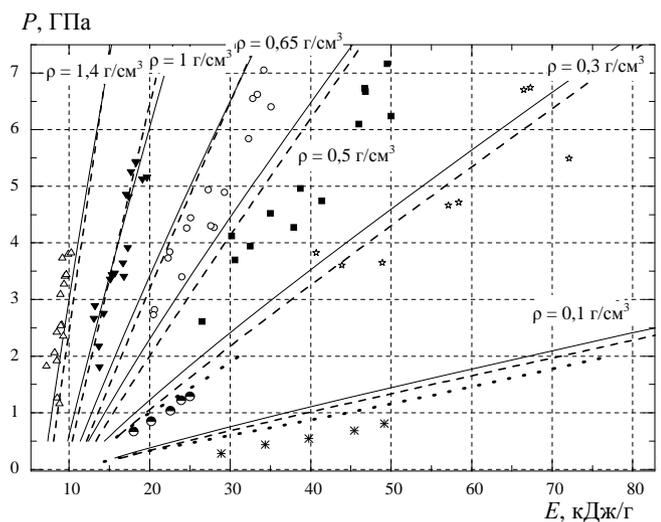


Рис. 13. Зависимость давления от энергии на изохорах (ρ , $\text{г/см}^3 = 1,4; 1; 0,675; 0,5; 0,3; 0,1$). Расчет по УРС: сплошные линии – данная работа; пунктирные линии – РОСА-М [9, 10]; точки – PURGATORIO [20]; маркеры – экспериментальные данные, приведенные в [20, 48]

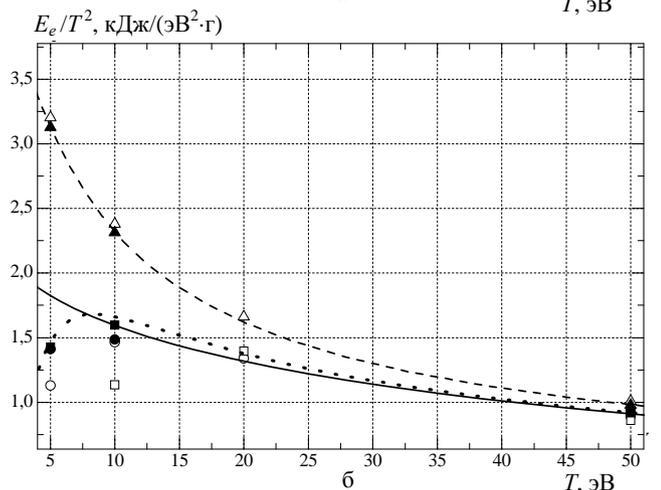
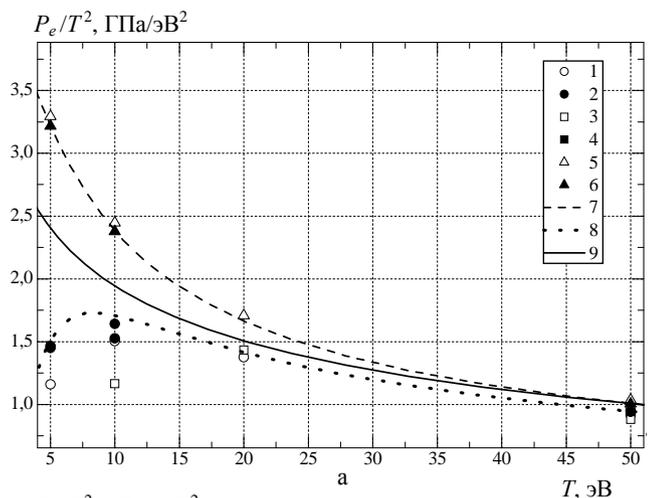


Рис. 14. Зависимость приведенных электронных тепловых давления и энергии от температуры на изохоре $2,71 \text{ г/см}^3$. Расчет по моделям: 1 – ТФДВ [31]; 2 – ТФДВ [30]; 3 – ТФД [31]; 4 – ТФД [30]; 5 – ТФ [31]; 6 – ТФ [30]; 7 – ТФ [7]; 8 – ТФП [7]; 9 – данная работа

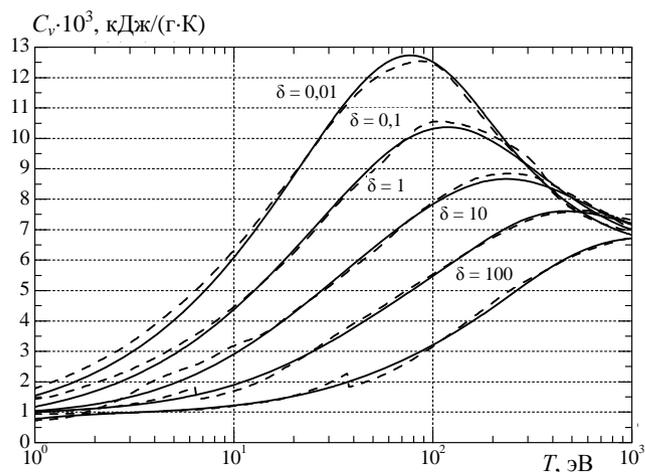


Рис. 15. Зависимость удельной изохорной теплоемкости алюминия от температуры на изохорах. Расчет: сплошные линии – УРС данной работы; штриховые линии – модель ТФПК [7, 23]

Список литературы

1. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Каякин А. А., Куделькин В. Г. Полуэмпирическая модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Ч. 1. Описание модели // См. наст. вып. С. 19–25.
2. Greene R. G., Luo H., Ruoff A. L. Al as a simple solid: High Pressure Study to 220 GPa (2.2 Mbar) // *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 73, N 15. P. 2075–2078.
3. Dewaele A., Loubeyre P. Equation of state of six metals above 94 GPa // *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 70. P. 094112.
4. Akahama Y., Nishimura M., Kinoshita K., Kawamura H., Ohishi Y. Evidence of a fcc-hcp transition in aluminum at multimegabar pressure // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96. P. 045505.
5. Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е., Кузьменков Е. А. Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов // ПМТФ. 1987, № 1. С. 134–146.
6. Levashov P. R., Khishchenko K. V., Minakov D. V., Sin'ko G. V., Smirnov N. A. ABINITIO calculations of equations of state for metals and comparison with semiempirical approaches // XI Международная конференция «Супервычисления и компьютерное моделирование». 2009.
7. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975.
8. Hitose Nagara, Tuto Nakamura. Theory of lattice-dynamical properties of compressed solids // *Phys. Rev. B.* 1985. Vol. 31, N 4. P. 1844–1855.
9. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А. Полуэмпирическая модель уравнения состояния металлов РОСА-М.

Уравнение состояния алюминия // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 3. С. 24–36.

10. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов. Уравнение состояния алюминия // *Физика горения и взрыва.* 2008. Т. 44, № 2. С. 61–75.

11. 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, 2006.

12. Celliers P. M., Collins G. W., Hicks D. G., Eggert J. H. Systematic uncertainties in shock-wave impedance-match analysis and the high-pressure equation of state of Al // *J. Appl. Phys.* 2005. Vol. 98(5). P. 113529.

13. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Куделькин В. Г. Модель уравнения состояния с переменной теплоемкостью ядер и электронов с учетом температуры Дебая. Уравнения состояния бериллия и алюминия // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 1/2. С. 51–64.

14. LASL Shock Hugoniot Data. Berkeley. Los Angeles. London: University of California press, 1980. P. 658.

15. Knudson M. D., Asay J. R., Deeney C. Adiabatic release measurements in aluminum from 240 to 500 GPa states on the principal Hugoniot // *J. of Appl. Phys.* 2005. Vol. 97. P. 073514-1-073514-14.

16. Ragan III C. E. Shock-wave experiments at three-fold compression // *Phys. Rev. A.* 1984. Vol. 29, N 3. P. 1391–1402.

17. 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, N 7. P. 4420–4431.

18. Mitchell A. C., Nellis W. J., Moriarty J. A., Heine R. A., Holmes N. C., Tipton R. E., Repp G. W. Equation of state of Al, Cu, Mo, and Pb at shock pressures up to 2.4 TPa (24 Mbar) // *J. Appl. Phys.* 1991. Vol. 69(5). P. 2981–2986.

19. Ragan III C. E. Shock compression measurements at 1 to 7 TPa // *Phys. Rev. Ser. A.* 1982. Vol. 25, N 6. P. 3360–3375.

20. Wilson B., Sonnad V., Sterne P., Isaacs W. PURGATORIO – a new implementation of the INFERNO algorithm // *J. of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.* 2006. Vol. 99. P. 658.

21. Barshalom A., Oreg J. Recent progress in the EOSTA model // *High Energy Density Physics* 3. 2007. P. 12.

22. Rozsnyai B. F., Albritton J. R., Young D. A., Sonnad V. N., Liberman D. A. Theory and experiment for ultrahigh pressure shock Hugoniots // *Phys. Lett. A.* 2001. Vol. 291. P. 226–231.

23. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества: Препринт № 59. М.: ИПМ АН СССР, 1978.
24. Mazevet S., Ze'rah G. Ab Initio Simulations of the K-Edge Shift along the Aluminum Hugoniot // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 101. P. 155001.
25. Аврорин Е. Н., Водолага Б. К., Волошин Н. П., Куропатенко В. Ф., Коваленко Г. В., Симоненко В. А., Черноволюк Б. Т. Экспериментальное подтверждение оболочечных эффектов на ударных адиабатах алюминия и свинца // *Письма в ЖЭТФ.* 1986. Т. 43. Вып. 5. С. 241–244.
26. Владимиров А. С., Волошин Н. П., Ногин В. Н., Петровцев А. В., Симоненко В. А. Ударная сжимаемость алюминия при давлениях $P > 1$ Гбар // *Письма в ЖЭТФ.* 1984. Т. 39. Вып. 2. С. 69–72.
27. Симоненко В. А., Волошин Н. П., Владимиров А. С., Нагибин А. П., Ногин В. Н., Попов В. А., Сальников В. А., Шойдин Ю. А. Абсолютные измерения ударной сжимаемости алюминия при давлениях $P > 1$ ТПа // *ЖЭТФ.* 1985. Т. 88. Вып. 4. С. 1452–1459.
28. Воропинов А. И., Гандельман Г. М., Подвальный В. Г. Электронные энергетические спектры и уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах // *УФН.* 1970. Вып. 2. С. 193–224.
29. 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 // *Phys. Rev. Lett.* 1988. Vol. 60, N 14. P. 1414–1417.
30. Fromy P., Deutsch C., Maynard G. Thomas – Fermi-like and average atom models for dense and hot matter // *Phys. Plasmas.* 1996. Vol. 3, N 3. P. 714.
31. Perrot F. Gradient correction to the statistical electronic free energy at nonzero temperatures: Application to equation-of-state calculations // *Phys. Rev. A.* 1979. Vol. 20. P. 586.
32. Чернов С. В. Зонный расчет холодного сжатия лития и алюминия // *Математическое моделирование.* 1989. Т. 1, № 2. С. 36–48.
33. Калиткин Н. Н., Ритус И. В., Миронов А. М. Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов: Препринт № 46. М.: ИПМ АН СССР, 1983.
34. Воропинов А. И., Ильяева Л. А., Подурец М. А., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф. Ударные адиабаты пористых алюминия, титана, меди и вольфрама и адиабаты Пуассона пористых меди и вольфрама в области неполного закрытия пор. Термодинамическая модель и эксперимент // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика.* 2005. Вып. 1–2. С. 45–50.
35. Asay J. R., Hayes D. B. Shock-compression and release behavior near melt states in aluminum // *J. of Appl. Phys.* 1975. Vol. 46, N 11. P. 4789–4799.
36. Qiang Wu, Fuqian Jing. Thermodynamic equation of state and application to Hugoniot predictions for porous materials // *J. Appl. Phys.* 1996. Vol. 80(8). P. 4343.
37. Xianwen Ran, Yuying Yu, Hua Tan, Wenhui Tang. Behavior of aluminum shear modulus in solid-liquid mixed phase: Estimation with percolation theory // *J. of Appl. Phys.* 2008. Vol. 103, N 11. P. 103539.
38. Gérald Faussurier, Christophe Blancard, Pier Luigi Silvestrelli. Evaluation of aluminum critical point using an ab initio variational approach // *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 79. P. 134202.
39. Roland W. Ohse, Hilmar von Tippelskirch. The critical constants of the elements and of some refractory materials with high critical temperatures (*A review*) // *High Temperatures-High Pressures.* 1977. Vol. 9. P. 367–385.
40. Фортов В. Е., Дремин А. Н., Леонтьев А. А. Оценка параметров критической точки // *Теплофизика высоких температур.* 1975. Т. 13, № 5. С. 1072–1080.
41. Синько Г. В., Смирнов Н. А. Расчет из первых принципов уравнения состояния и упругих констант алюминия в области отрицательных давлений // *Письма в ЖЭТФ.* 2002. Т. 75. Вып. 4. С. 217–219. (Исправления в «Письма в ЖЭТФ». Т. 75. Вып. 5–6).
42. Синько Г. В., Смирнов Н. А. О существовании структурного перехода в алюминии при давлениях $\sim 1,5$ Мбар и температуре $\geq 1000\text{K}$ // *IX Харитоновские чтения РФЯЦ-ВНИИЭФ. Саров.* 2007. С. 287–291.
43. 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.
44. Hansen J. P. Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. I. Equilibrium Properties of the Classical One-component Plasma // *Phys. Rev. A.* 1973. Vol. 8, N 6. P. 3096–3109.
45. Pollock E. L., Hansen J. P. Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. II. Equilibrium Properties and Melting Transition of the Crystallized One-component Plasma // *Phys. Rev. A.* 1973. Vol. 8, N 6. P. 3110–3122.
46. Karl A. Gschneider. Physical Properties and Interrelationships of Metallic and Semimetallic Elements // *Solid State Physics.* 1964. Vol. 16. P. 275–426.
47. Элементы: Справочник / Под ред. Дж. Эмсли. М.: Мир, 1993.
48. Jean Clérouin, Pierre Noiret. Direct measurements and ab initio simulations for expanded fluid aluminum in the metal-nonmetal transition range // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 78. P. 224203.
49. Свойства элементов: Справочник / Под ред. М. Е. Дрица. М.: Металлургия, 1985.
50. Чиркин В. С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат, 1968.
51. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989.
52. Новикова С. И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974.
53. Физические величины: Справочник: Под ред. И. С. Григорьевой, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
54. Nellis W. J., Mitchell A. C., Young D. A. 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, N 1. P. 304–310.