

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ МЕТАЛЛОВ. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ

Д. Г. Гордеев, Л. Ф. Гударенко, М. В. Жерноклетов, В. Г. Куделькин,
М. А. Мочалов

РФЯЦ, ВНИИ экспериментальной физики, 607180 Саров, gud@vniief.ru

Описано полуэмпирическое уравнение состояния металлов. Его возможности продемонстрированы на примере разработки уравнения состояния алюминия. Представлены новые экспериментальные данные о положении изоэнтропы алюминия при разгрузке из состояния $p = 229.71$ ГПа на ударной адиабате в аэрогель (SiO_2) плотностью 0.08 г/см³.

Ключевые слова: уравнение состояния, металлы, алюминий, потенциальные составляющие, тепловой вклад ядер, электроны, ударная адиабата, изоэнтропа.

ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени в литературе описаны десятки полуэмпирических уравнений состояния, которые отличаются областями применения, количеством свободных параметров, математической формой. Несмотря на многолетние исследования в этой области, вопрос о предпочтительности той или иной формы уравнения состояния, по-видимому, не решен. Одной из целей разработчиков полуэмпирических уравнений состояния является описание области состояний, в которых в настоящее время не достигнута необходимая для прикладных расчетов точность. Ведется поиск эффективных физически обоснованных зависимостей, позволяющих с использованием возможно меньшего объема экспериментальной информации и количества подбираемых параметров описать с приемлемой точностью требуемую область состояний. В статье представлены результаты работы по модификации полуэмпирического уравнения состояния металлов [1]. Модификация позволила расширить область его применения в сторону больших температур и больших сжатий, уменьшить количество параметров и упростить процедуру их подбора. В библиотеке уравнений состояния ВНИИЭФ [2] разработанное уравнение имеет название РОСА-М.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ

В данной работе, как обычно в полуэмпирическом уравнении состояния (см., например, [3–5]), используется аддитивная форма соотношений для расчета давления и внутренней энергии:

$$p(\delta, T) = p_x(\delta) + p_p(\delta, T) + p_e(\delta, T), \quad (1)$$

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

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, учитывающие движение свободных термически возбужденных электронов.

В зависимостях, используемых в данном уравнении для представления потенциальных составляющих, выделено три участка: $0 \leq \delta \leq 1$, $1 \leq \delta \leq \delta_c$, $\delta > \delta_c$. Здесь δ_c — точка начала сшивки зависимостей $p_x(\delta)$, 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.

При $\delta = 1$ давление в веществе нормируется на нормальные условия: $\rho = \rho_0$, $p_0 = 10^{-4}$ ГПа, $T = 293$ К. Таким образом, потенциальное давление в точке $\delta = 1$ определяется разностью $p_0 - p_T$ ($\delta = 1$, $T = 293$ К), где $p_T = p_p + p_e$. Обозначим его p_{x0} . Значения $p_x = 0$ и $E_x = 0$ будут достигнуты в точке $\rho = \rho_{0к}$ ($\rho_{0к}$ — кристаллическая плотность вещества при $T = 0$); $E_x(\delta = 1) = E_{x0}$.

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

$$p_x(\delta) = a\delta^{n+1} + b\delta^{m+1} + c\delta^{l+1}. \quad (3)$$

Потребуем, чтобы для зависимостей p_x и E_x в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$ выполнялись следующие условия:

$$p_x|_{\delta=1} = p_{x0}; \quad p_x|_{\delta=0} = 0; \quad p_x|_{\delta < 1} < 0;$$

$$E_x|_{\delta=1} = E_{x0}; \quad E_x|_{\delta=0} = Q_{св};$$

$$\left. \frac{dp_x}{d\delta} \right|_{\delta=1} = p'_{x0}; \quad \left. \frac{d^2 p_x}{d\delta^2} \right|_{\delta=1} = p''_{x0}.$$

Последние два условия означают сшивку потенциального давления до второй производной с расчетами по формулам, предназначенным для описания потенциальных составляющих на участке $1 \leq \delta \leq \delta_c$; p'_{x0} , p''_{x0} — соответственно первая и вторая производные, вычисленные по этим формулам в точке $\delta = 1$; $Q_{св}$ — энергия связи вещества.

Из (3) и условия термодинамической согласованности следует выражение для расчета потенциальной энергии в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$:

$$E_x(\delta) = \frac{1}{\rho_0} \left[a \frac{\delta^n}{n} + b \frac{\delta^m}{m} + c \frac{\delta^l}{l} \right] + Q_{св}, \quad (4)$$

где энергия сублимации (связи) $Q_{св}$ связана с другими параметрами зависимости $E_x(\delta)$ соотношением

$$Q_{св} = E_{x0} - \frac{1}{\rho_0} \left[\frac{a}{n} + \frac{b}{m} + \frac{c}{l} \right],$$

полученным из условия $E_x(\delta = 1) = E_{x0}$.

Учитывая приведенные выше условия, получим формулы для расчета некоторых свободных параметров выражений (3) и (4):

$$n = \frac{p''_{x0} - p'_{x0}(m+l+1) + p_{x0}(l+1)(m+1)}{p'_{x0} - \rho_0(Q_{св} - E_{x0})ml - p_{x0}(m+l+1)},$$

$$a = \frac{n}{(n-l)(n-m)} \times \\ \times [p'_{x0} - \rho_0(Q_{св} - E_{x0})ml - p_{x0}(m+l+1)],$$

$$b = \frac{m}{(m-l)(m-n)} \times \\ \times [p'_{x0} - \rho_0(Q_{св} - E_{x0})nl - p_{x0}(n+l+1)],$$

$$c = p_{x0} - a - b.$$

Параметры m и l выбираются из условия наилучшего описания критической точки двухфазной области жидкость — пар и данных, полученных в ударно-волновых экспериментах при исследовании изоэнтроп расширения и ударных адиабат сильнопористых образцов.

В настоящее время при разработке уравнения состояния конкретного вещества часто используется основная ударная адиабата (ударная адиабата образцов вещества с нормальной начальной плотностью). Обычно она представляет собой полученную в результате расчетов или аппроксимации экспериментальных данных определенного вида аналитическую зависимость, связывающую скорость фронта D ударной волны с массовой скоростью за фронтом u . Из этой зависимости с использованием законов сохранения устанавливается связь между давлением и плотностью за фронтом ударной волны. В рассматриваемом нами уравнении состояния (1), (2), как и практически во всех полуэмпирических уравнениях, давление можно представить как сумму потенциальной и тепловой составляющих. Если заданы параметры тепловых составляющих уравнения состояния, то потенциальные составляющие в области, где известна ударная адиабата, могут быть определены в табличном виде в результате решения дифференциального уравнения.

Воспользуемся уравнением Гюгонио:

$$E_{\Gamma} - E_0 = (p_{\Gamma} + p_0) \frac{k\delta - 1}{2\rho_0\delta}, \quad (5)$$

законом сохранения импульса:

$$p_{\Gamma} = p_0 + \rho_0 D u \frac{1}{k}, \quad (6)$$

законом сохранения массы:

$$\delta = \frac{D}{(D-u)k}, \quad (7)$$

где $k = \rho_0/\rho_{00}$ — коэффициент пористости вещества, p_{Γ} , E_{Γ} — давление и энергия на фронте ударной волны.

Уравнения (5)–(7) дополняются ударной адиабатой вещества в виде зависимости $D(u)$. Уравнения (1), (2) и (5)–(7) позволяют составить дифференциальное уравнение для определения температуры T за фронтом ударной волны.

Учитывая, что на ударной адиабате $p(\delta, T) = p_\Gamma(\delta)$, $E(\delta, T) = E_\Gamma(\delta)$, запишем

$$p_\Gamma(\delta) = \rho_0 \delta^2 E'_x(\delta) + p_T(\delta, T), \quad (8)$$

$$E_\Gamma(\delta) = E_x(\delta) + E_T(\delta, T). \quad (9)$$

Продифференцировав (9) по δ вдоль ударной адиабаты, получим обыкновенное дифференциальное уравнение относительно температуры $T(\delta)$ на ударной адиабате:

$$\left(\frac{dT}{d\delta}\right)_\Gamma = \frac{E'_\Gamma(\delta) - \left(\frac{\partial E_T}{\partial \delta}\right)_T - \frac{p_\Gamma(\delta) - p_T(\delta, T)}{\rho_0 \delta^2}}{\left(\frac{\partial E_T}{\partial T}\right)_\delta} \quad (T(\delta = 1) = 293 \text{ К}). \quad (10)$$

В результате решения (10) находится таблица значений температуры в зависимости от плотности вдоль ударной адиабаты — $T_i(\delta_i)$. В точках, где известна температура, потенциальные составляющие вычисляются по формулам

$$p_{x_i}(\delta_i) = p_\Gamma(\delta_i) - p_T(\delta_i, T_i), \quad (11)$$

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

Уравнение (10) может использоваться для любого уравнения состояния, позволяющего 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 различными функциями, поэтому расчет по (10), (11) таблицы значений $p_x(\delta)$ проводится только на этапе подбора параметров уравнения состояния. В данной работе для аппроксимации используются интерполяционные кубические сплайны класса C^2 [6]. На участках $[\delta_i, \delta_{i+1}]$ сплайн имеет вид

$$p_x(\delta) = p_{x_i} + h_i t [m_i + t(B_i + tA_i)], \quad (12)$$

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 ; $m_i \equiv$

$\frac{dp_x}{d\delta} \Big|_{\delta=\delta_i}$ — 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, аппроксимируемого сплайнами. Они вычисляются по заданной зависимости $D(u)$. В точке $\delta = 1$ имеет место касание второго порядка ударной адиабаты с нормальной изоэнтропой, и можно записать

$$\frac{dp_\Gamma}{d\delta} \Big|_{\delta=1} = \left(\frac{\partial p}{\partial \delta}\right)_S \Big|_{\substack{\delta=1 \\ T=293}},$$

где $\frac{dp_\Gamma}{d\delta} \Big|_{\delta=1} = \rho_0 D_0^2$, $D_0 = D(u = 0)$.

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

$$\frac{dp_x}{d\delta} \Big|_{\delta=1} = \rho_0 D_0^2 - \left(\frac{\partial p_T}{\partial \delta}\right)_S \Big|_{\substack{\delta=1 \\ T=293}}.$$

В приведенных выражениях D_0 имеет смысл изоэнтропической скорости звука c_0 в точке $\rho = \rho_0$ ($\delta = 1$).

В точке $\delta = \delta_c$ наклон «холодной» кривой определяется при решении дифференциального уравнения (10) по формуле

$$\frac{dp_x}{d\delta} \Big|_{\delta=\delta_c} = p'_\Gamma(\delta_c) - \left(\frac{\partial p_T}{\partial \delta}\right)_T - \left(\frac{\partial p_T}{\partial T}\right)_\delta \left(\frac{dT}{d\delta}\right)_\Gamma.$$

Параметры уравнения состояния c_0 и $p'_c = \frac{dp_x}{d\delta} \Big|_{\delta=\delta_c}$ являются задаваемыми параметрами уравнения состояния.

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

$$E_x(\delta) = E_{x0} + \frac{1}{\rho_0} \left[\Phi(\delta_i, \delta) + \sum_{j=1}^i \Phi(\delta_{j-1}, \delta_j) \right], \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(\delta_i, \delta) = & \frac{A_i t^2}{2} + (B_i - 2A_i \tau_i) t + \\ & + [m_i + \tau_i (3A_i \tau_i - 2B_i)] \ln \frac{\delta}{\delta_i} + \\ & + [\delta_i (m_i + \tau_i (A_i \tau_i - B_i)) - p_{x_i}] \left(\frac{1}{\delta} - \frac{1}{\delta_i} \right), \end{aligned}$$

$$\delta_i < \delta \leq \delta_{i+1}, \quad \tau_i = \frac{\delta_i}{h_i}.$$

При $\delta > \delta_c$ потенциальные составляющие давления и энергии определяются по алгоритму, обеспечивающему переход от зависимости $p_x(\delta)$, рассчитанной по уравнению (12), к зависимости, рассчитанной по модели Томаса — Ферми с квантовой и обменной поправками (ТФП) [7]. Для обеспечения непрерывности функции и ее производной в точке $\delta = \delta_c$ используется алгоритм, аналогичный применяемому в программе PANDA [8]. По данному алгоритму при $\delta \geq \delta_c$ потенциальная составляющая энергии рассчитывается по формуле

$$E_x(\delta) = (E_{\text{ТФП}}(\delta) - E_{\text{ТФП}}(\delta_c))Y(\delta) + \Delta E_x, \quad (14)$$

откуда с помощью основного термодинамического тождества получается соотношение

$$p_x(\delta) = p_{\text{ТФП}}(\delta)Y(\delta) + \delta^2 \rho_0 (E_{\text{ТФП}}(\delta) - E_{\text{ТФП}}(\delta_c)) \frac{dY}{d\delta}. \quad (15)$$

В формулах (14), (15) $p_{\text{ТФП}}(\delta)$, $E_{\text{ТФП}}(\delta)$ — давление и энергия, рассчитываемые по модели ТФП [7], $Y(\delta) = 1 + (b_1 + b_2\delta^{-\alpha} + b_3\delta^{-2\alpha}) \times \delta^{-1}$ — интерполяционная функция. Константы ΔE_x , b_1 , b_2 и b_3 выбираются из условий непрерывности функций и их производных в точке δ_c :

$$E_x(\delta_c) = E_s(\delta_c), \quad p_x(\delta_c) = p_s(\delta_c), \\ p'_x(\delta_c) = p'_s(\delta_c), \quad p''_x(\delta_c) = p''_s(\delta_c),$$

где индексом s обозначены значения давления и энергии, рассчитываемые по формулам (12) и (13), 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 [7].

Вклад атомов решетки в тепловую часть энергии описывается с использованием выражения из работы [1], умноженного на функцию Дебая:

$$E_p(\delta, T) = D(z) \frac{2\psi_p(\delta) + T c_{v0} T}{\psi_p(\delta) + T} \frac{1}{2}. \quad (16)$$

Здесь $D(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z \frac{t^3 dt}{\exp t - 1}$ — функция Дебая;

$z = \frac{\theta(\delta, T)}{T}$; $\theta(\delta, T)$ — температура Дебая; c_{v0} — теплоемкость решетки при нормальных условиях; $\psi_p(\delta)$ — функция, характеризующая высоту потенциального барьера, который нужно преодолеть атому, чтобы уйти из узла решетки, и зависящая только от плотности (расстояния между атомами).

Примем свободную энергию в виде, соответствующем свободной энергии в форме Дебая без учета членов, не зависящих от температуры, которые эффективно учитываются в потенциальных составляющих:

$$F_p(\delta, T) = c_{v0} T \left(\ln(1 - \exp(-z)) - \frac{1}{3} D(z) \right). \quad (17)$$

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

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

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

Связь θ_D с функцией $\Gamma_{p0}(\delta)$, характеризующей зависимость коэффициента Грюнайзена ядер (решетки) «холодного» вещества от плотности (при $T \cong 0$), определяется следующим образом:

$$\theta_D(\delta) = \theta_0 \exp \left(\int_1^\delta \frac{\Gamma_{p0}(x)}{x} dx \right), \quad \theta_0 = \theta_D(1).$$

Дифференцируя (17) по плотности, получим выражение для давления:

$$p_p(\delta, T) = D(z) \frac{2\psi_p(\delta)\Gamma_{p0}(\delta) + T\gamma_{T \rightarrow \infty} \rho_0 \delta T \frac{c_{v0}}{2}}{\psi_p(\delta) + T} \quad (18)$$

при условии, что функции $\psi_p(\delta)$ и $\Gamma_{p0}(\delta)$ связаны дифференциальным уравнением, решение которого имеет общий вид:

$$\psi_p(\delta) = \psi_{p0} \delta^{-\gamma_{T \rightarrow \infty}} \exp \left(2 \int_1^\delta \Gamma_{p0}(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right)$$

$$(\psi_{p0} = \psi_p(1)), \quad (19)$$

$\gamma_{T \rightarrow \infty}$ — асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена решетки при $T \rightarrow \infty$.

Из (16) и (18) следуют выражения для коэффициента Грюнайзена и теплоемкости ионов:

$$\Gamma_p(\delta, T) = \frac{2\psi_p(\delta)\Gamma_{p0}(\delta) + T\gamma_{T \rightarrow \infty}}{2\psi_p(\delta) + T}, \quad (20)$$

$$c_v(\delta, T) = D(z) \left(\frac{\psi_p^2(\delta)}{(\psi_p(\delta) + T)^2} + 1 \right) \frac{c_{v0}}{2} + D'_z(z) \frac{2\psi_p(\delta) + T}{\psi_p(\delta) + T} \frac{c_{v0}T}{2} \frac{\partial z}{\partial T}, \quad (21)$$

где $D'_z(z)$ — производная от функции Дебая по аргументу, а производная аргумента по температуре

$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{z}{2T} \left[1 + \frac{\psi_p(\delta)}{\psi_p(\delta) + T} \right].$$

Из соотношений (20), (21) следуют предельные переходы:
при $T \rightarrow 0$ (твердое тело):

$$c_v(\delta, T) \rightarrow 0, \quad \Gamma_p(\delta, T) \rightarrow \Gamma_{p0}(\delta), \\ p_p(\delta, T) \rightarrow 0, \quad E_p(\delta, T) \rightarrow 0,$$

при $\frac{T}{\psi_p(\delta)} \rightarrow \infty$ (идеальный газ):

$$c_v(\delta, T) \rightarrow \frac{c_{v0}}{2}, \quad \Gamma_p(\delta, T) \rightarrow \gamma_{T \rightarrow \infty},$$

$$p_p(\delta, T) \rightarrow \rho_0 \delta \frac{c_{v0}T}{2} \gamma_{T \rightarrow \infty}, \quad E_p(\delta, T) \rightarrow \frac{c_{v0}T}{2}.$$

К настоящему времени известно большое число различных видов зависимостей для представления функции коэффициента Грюнайзена от плотности. Наиболее известна обобщенная формула из работы [5], получившая развитие в работе [9]. Однако на практике чаще всего используются формальные аппроксимационные зависимости. При их анализе не удалось найти такую, которая позволила бы задавать разные значения Γ при $\delta \rightarrow 0$ и при $\delta \rightarrow \infty$. В настоящей работе использована зависимость, которая обеспечивает такую возможность:

$$\Gamma_{p0}(\delta) = A_p + \frac{\gamma_{1p} - A_p}{1 + (\delta/\delta_{mp})^{a_p}} +$$

$$+ \frac{\gamma_{2p} - A_p}{1 + (\delta/\delta_{np})^{-b_p}}. \quad (22)$$

Данный вид зависимости имеет следующие предельные переходы:

при $\delta \rightarrow 0$ $\Gamma_{p0}(\delta) \rightarrow \gamma_{1p}$,

при $\delta \rightarrow \infty$ $\Gamma_{p0}(\delta) \rightarrow \gamma_{2p}$.

Условие $\Gamma_{p0}(\delta = 1) = \gamma_{0p}$, где γ_{0p} — значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях, выполняется за счет коэффициента A_p (см. (22)), который связан с другими параметрами зависимости (22) соотношением

$$A_p = \frac{\left(\gamma_{0p} - \frac{\gamma_{1p}}{1 + (\delta_{mp})^{-a_p}} - \frac{\gamma_{2p}}{1 + (\delta_{np})^{b_p}} \right)}{\left(1 - \frac{1}{1 + (\delta_{mp})^{-a_p}} - \frac{1}{1 + (\delta_{np})^{b_p}} \right)}.$$

Параметры a_p , b_p , δ_{mp} , δ_{np} отвечают за скорость выхода функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ на асимптотические значения.

Из (17) следует выражение для расчета энтропии:

$$S_p(\delta, T) = - \left(\frac{\partial F_p(\delta, T)}{\partial T} \right)_\delta = \\ = c_{v0} \left[\frac{1}{2} D(z) \left(\frac{\psi_p(\delta, T)}{\psi_p(\delta, T) + T} + \frac{5}{3} \right) - \right. \\ \left. - \ln(1 - \exp(-z)) \right]. \quad (23)$$

С использованием закона плавления Линдемана, выраженного через коэффициент Грюнайзена решетки [10], получена относительно простая зависимость для расчета температуры на линии плавления через параметры данного уравнения состояния:

$$T_m(\delta) = T_{m0} \left(\frac{\delta}{\delta_{m0}} \right)^{\gamma_{T \rightarrow \infty} - \frac{2}{3}} \frac{\psi(\delta)}{\psi(\delta_{m0})}, \quad (24)$$

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

Для расчета вклада в давление и энергию термически возбужденных свободных электронов использовались формулы из [1], модифицированные за счет введения в функцию f_e температурной зависимости:

$$p_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T \Phi \rho_0 \delta \left(\left(\frac{\partial f_e}{\partial \delta} \right)_T \delta \ln \delta + f_e(\delta, T) \right) \times$$

$$\times \frac{T^2}{T_{\Phi} \delta f_e(\delta, T) + T}, \quad (25)$$

$$E_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} \left(1 - T \left(\frac{\partial f_e}{\partial T} \right)_{\delta} \ln \delta \right) \times \frac{T^2}{T_{\Phi} \delta f_e(\delta, T) + T}, \quad (26)$$

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

$$f_e(\delta, T) = \frac{f_{e0}(\delta) \psi_e(\delta) + T \gamma_{eT}}{\psi_e(\delta) + T}, \quad (27)$$

где $\psi_e(\delta) = T_g \delta^{k_e}$ — функция, которая определяет скорость перехода коэффициента Грюнайзена электронов $\Gamma_e(\delta, T)$ к предельному значению γ_{eT} при $T \rightarrow \infty$.

Из (25), (26) следует формула для коэффициента Грюнайзена электронов:

$$\Gamma_e(\delta, T) = \frac{\left(\frac{\partial f_e(\delta, T)}{\partial \delta} \right)_T \delta \ln \delta + f_e(\delta, T)}{1 - T \left(\frac{\partial f_e(\delta, T)}{\partial T} \right)_{\delta} \ln \delta}. \quad (28)$$

Тогда получим следующие предельные переходы:

при $T \rightarrow 0$:

$$f_e(\delta, T) \rightarrow f_{e0}(\delta), \quad \Gamma_e(\delta, T) \rightarrow \frac{df_{e0}}{d\delta} \delta \ln \delta + f_{e0}(\delta),$$

$$F_e(\delta, T) \rightarrow -\frac{1}{2} \beta_0 T^2 \delta^{-f_{e0}(\delta)}, \quad c_{ve} \rightarrow \beta_0 T \delta^{-f_{e0}(\delta)},$$

при $T \rightarrow \infty$:

$$f_e(\delta, T) \rightarrow \gamma_{eT}, \quad \Gamma_e(\delta, T) \rightarrow \gamma_{eT},$$

$$F_e(\delta, T) \rightarrow -\frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} T \ln \left(\frac{T}{T_{\Phi} \delta \gamma_{eT}} \right),$$

$$c_{ve} \rightarrow \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi},$$

где $c_{ve} = (\partial E_e / \partial T)_{\rho}$ — изохорная теплоемкость электронов.

Таким образом, при низких температурах электронный газ ведет себя как полностью вырожденный ($c_{ve} \sim T$), а $E_e \sim T^2$; 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 ионизированного 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 $T \rightarrow \infty$.

При $T = 0$ из (27) следует $f_e = f_{e0}(\delta)$, тогда из (28) получим

$$\Gamma_e(\delta, T = 0) = \Gamma_{e0}(\delta) = \frac{df_{e0}(\delta)}{d\delta} \delta \ln \delta + f_{e0}(\delta). \quad (29)$$

Для функции $\Gamma_{e0}(\delta)$, как и для коэффициента Грюнайзена ядер, используется зависимость вида

$$\Gamma_{e0}(\delta) = A_e + \frac{\gamma_{1e} - A_e}{1 + (\delta/\delta_{me})^{a_e}} + \frac{\gamma_{2e} - A_e}{1 + (\delta/\delta_{ne})^{-b_e}}. \quad (30)$$

Из (29) можно записать:

$$f_{e0}(\delta) = \gamma_{1e} + \gamma_{2e} - A_e - \frac{\gamma_{1e} - A_e}{a_e \ln \delta} \ln \left(\frac{1 + (\delta/\delta_{me})^{a_e}}{1 + (\delta_{me})^{-a_e}} \right) + \frac{\gamma_{2e} - A_e}{b_e \ln \delta} \ln \left(\frac{1 + (\delta/\delta_{ne})^{-b_e}}{1 + (\delta_{ne})^{b_e}} \right). \quad (31)$$

В точке $\delta = 1$ функция $f_{e0}(\delta)$ вида (31) имеет неопределенность (деление нуля на ноль). Для ее вычисления в окрестности данной точки используется алгоритм, основанный на разложении ее в ряд в окрестности этой точки.

Для рассматриваемого уравнения состояния из условий $\delta \rightarrow \delta_{\max}$, $p \rightarrow \infty$, $T \rightarrow \infty$ можно получить соотношение, связывающее максимальное сжатие металла на ударной адиабате δ_{\max} с другими параметрами уравнения состояния:

$$\delta_{\max} = 2 \frac{c_{v0} + \beta_0 T_{\Phi}}{c_{v0} \gamma_{T \rightarrow \infty} + \beta_0 T_{\Phi} \gamma_{eT}} + 1.$$

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

$$\gamma_{eT} = \frac{1}{\beta_0 T_{\Phi}} \left(2 \frac{c_{v0} + \beta_0 T_{\Phi}}{\delta_{\max} - 1} - c_{v0} \gamma_{T \rightarrow \infty} \right). \quad (32)$$

Энтропия электронов —

$$S_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} \left[\left(1 - T \left(\frac{\partial f_e}{\partial T} \right)_{\delta} \ln \delta \right) \times \right. \\ \left. \times \frac{T}{T_{\Phi} \delta f_e(\delta, T) + T} + \ln \left(1 + \frac{T}{T_{\Phi} \delta f_e(\delta, T)} \right) \right].$$

Полная энтропия —

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

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 .

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ

С использованием описанной модели разработано уравнение состояния алюминия. Параметры уравнения состояния можно разделить на три группы. Первая — это параметры, используемые при расчете потенциальных составляющих. К ним относятся коэффициенты зависимости $p_x(\delta)$ (3) в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$, коэффициенты сплайна (12) 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 (15) для расчета $p_x(\delta)$ в диапазоне $\delta > \delta_c$.

Для расчета по уравнениям (10), (11) таблицы зависимостей $p_x(\delta)$ в области, где известна ударная адиабата, использована зависимость $D(u)$, полученная в результате аппроксимации экспериментальных данных для алюминия [11–15]:

$$D(u) = C_0 + C_1 u + \frac{C_2 u}{u + C_3} + \\ + C_4 \sin[C_5 + C_6(1 - \exp(-C_7 u))], \quad (33)$$

где $C_0 = 5.219$ км/с, $C_1 = 1.01$, $C_2 = 7$ км/с, $C_3 = 14.2$ км/с, $C_4 = 0.082$ км/с, $C_5 = 1.55$, $C_6 = 11.92$, $C_7 = 0.12$ с/км. Отсюда следует значение скорости звука при нормальных условиях, определенное по результатам ударно-волновых экспериментов: $D(u = 0) = 5.301$ км/с.

Для точки начала сшивки зависимости $p_x(\delta)$, рассчитываемой по соотношению $D(u)$,

с зависимостью $p_x(\delta)$, рассчитываемой по модели ТФП [7], выбрано значение сжатия $\delta_c = 2.7$. Значения параметров зависимостей (3) и (4) частично определяются из условий сшивки до второй производной потенциального давления в точке $\delta = 1$ и нормировки на энергию сублимации (связи). Значения p_x в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$ рассчитываются автоматически на стадии подбора тепловых параметров по заданной зависимости $D(u)$ на ударной адиабате сплошных образцов. Получаемая таким образом табличная зависимость $p_x(\delta)$ аппроксимируется сплайнами (12), (13) с достаточной точностью с использованием четырех узлов на участке $(1, \delta_c)$. Значения коэффициентов b_i в (14), (15) также однозначно определяются значениями сшиваемых функций в точке δ_c . Подгоночными являются: коэффициенты m и l в зависимости (3), точка сшивки δ_c и параметр интерполяционной функции α .

Данные о коэффициенте Грюнайзена решетки γ_{p0} и изохорической теплоемкости решетки c_{v0} при нормальных условиях, энергии связи $Q_{св}$ приведены, например, в [16]. Значение теплоемкости также можно оценить, используя закон Дюлонга — Пти. Параметр ψ_{p0} может быть оценен по соотношению $\psi_{p0} = Q_{св}/c_{v0}$. Если применить отмеченную в [10] закономерность к зависимости $c_v(\rho, T)$ вида (21), то получим диапазон $\psi_{p0} \approx (20 \div 30)T_{m0}$. Значение температуры Дебая приведено в справочной литературе (например, в [16]). Значение ψ_{p0} и остальных параметров, относящихся к расчету вклада атомов, подобраны из условия наилучшего описания всей совокупности экспериментальных данных.

Известна формула для теоретической оценки коэффициента электронной теплоемкости β_0 (см., например, [3]) и справочные данные для β_0 (см., например, [16]). Коэффициент β_0 можно оценить, используя экспериментальные данные о зависимости теплоемкости от температуры. Параметр γ_{eT} определяется по соотношению (32). Величина δ_{\max} находится из расчетов ударной адиабаты по модели ТФП с поправкой Копышева для учета вклада ядер (ТФПК) [7, 17] в области сверхвысоких давлений, не исследованной в экспериментах.

Для расчета термодинамических функций по модели достаточно задать 44 параметра, из которых подгоночными являются максимум 23. Остальные однозначно определяются по имеющимся экспериментальным и справоч-

Таблица 1

Параметры уравнения состояния алюминия

Название	Символ	Значение
Плотность при нормальных условиях	ρ_0	2.71 г/см ³
Скорость звука при нормальных условиях	c_0	5.301 км/с
Энергия сублимации (связи)	$Q_{св}$	11.8 кДж/г
Параметры p_x при $\delta < 1$	m	10
	l	8.5
Значения δ и p_x в узлах сплайна	δ_1	1.21
	p_{x_1}	20.726 ГПа
	δ_2	1.57
	p_{x_2}	89.445 ГПа
	δ_3	1.86
	p_{x_3}	185.67 ГПа
	δ_4	2.37
Значение δ и p в точке начала сшивки зависимости $p_x(\delta)$, рассчитанной по ударной адиабате, с расчетами по модели ТФП	$\delta_5 = \delta_c$	2.7
	$p_{x_5} = p_c$	595.34 ГПа
$(dp_x/d\delta)_{\delta=\delta_c}$	p'_c	578.75 ГПа
Атомная масса	A	26.98
Атомный номер	Z	13
Параметр, отвечающий за «скорость перехода» на расчет $p_x(\delta)$ по модели ТФП	α	1
Теплоемкость при нормальных условиях	c_{v0}	$9.4 \cdot 10^{-4}$ кДж/(г · К)
Значение функции $\psi_p(\delta)$ при $\delta = 1$	ψ_{p0}	20 400 К
Коэффициент Грюнайзена решетки при $T = 0, \delta = 1$	γ_{0p}	2.15
Коэффициент Грюнайзена решетки при $T = 0, \delta \rightarrow 0$	γ_{1p}	0.5
Коэффициент Грюнайзена решетки при $T = 0, \delta \rightarrow \infty$	γ_{2p}	0.5
Параметры, определяющие скорость выхода функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ на асимптотические значения при $\delta \rightarrow 0$ и $\delta \rightarrow \infty$	a_p	3.54
	b_p	3.27
	δ_{mp}	0.787
	δ_{np}	0.893
Параметр, определяющий асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена решетки при $T \rightarrow \infty$	$\gamma_{T \rightarrow \infty}$	0.67
Экспериментальное значение температуры в точке плавления при $p = 1$ атм	T_{m0}	933 К
Экспериментальное значение δ в точке плавления при $p = 1$ атм	δ_{m0}	0.941
Температура Дебая при $\delta = 1$ и $T = 0$	θ_0	378 К
Коэффициент электронной теплоемкости	β_0	$3.5 \cdot 10^{-8}$ кДж/(г · К ²)
Коэффициент Грюнайзена электронов при $T = 0, \delta = 1$	γ_{0e}	0.693
Коэффициент Грюнайзена электронов при $T = 0, \delta \rightarrow 0$	γ_{1e}	0.237
Коэффициент Грюнайзена электронов при $T = 0, \delta \rightarrow \infty$	γ_{2e}	0.522
Параметры, определяющие скорость выхода функции $\Gamma_{e0}(\delta)$ на асимптотические значения при $\delta \rightarrow 0$ и $\delta \rightarrow \infty$	a_e	2.57
	b_e	2.43
	δ_{me}	0.443
	δ_{ne}	0.675
Значение максимального сжатия на ударной адиабате	δ_{max}	5.06
Параметры, отвечающие за скорость выхода коэффициента Грюнайзена электронов на асимптотическое значение при $T \rightarrow \infty$	T_g	930 000 К
	k_e	0.107
Значение энтропии при нормальных условиях	S_{298}^0	$1.05 \cdot 10^{-3}$ кДж/(г · К)

Примечания. Расчетное значение кристаллической плотности алюминия, соответствующее точке пересечения зависимости $p_x(\delta)$ с линией $p = 0$: $\rho_{0к} = 2.744$ г/см³. При нормальных условиях в точке $\rho = \rho_0$, $p = 1$ атм начальная энергия $E_0 = 0.16655$ кДж/г. При $T \rightarrow \infty$ коэффициент Грюнайзена электронов $\gamma_{eT} = 0.479$.

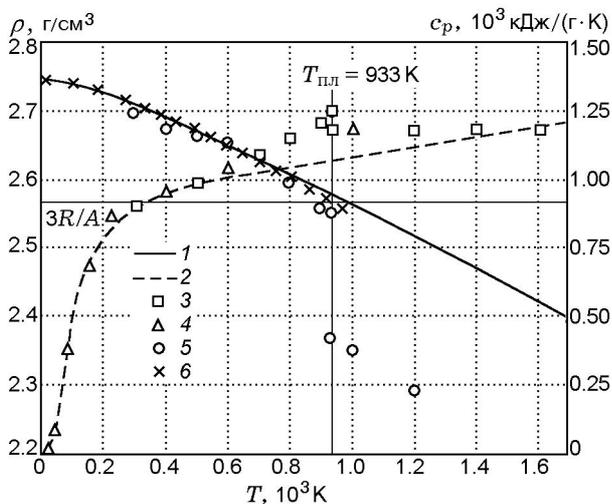


Рис. 1. Зависимости плотности и теплоемкости алюминия от температуры при нормальном давлении:

расчет по УРС данной работы: 1 — тепловое расширение, 2 — теплоемкость; эксперимент: 3, 4 — теплоемкость из [18, 20], 5 — тепловое расширение из [18]; 6 — аппроксимация данных по тепловому расширению из [19]

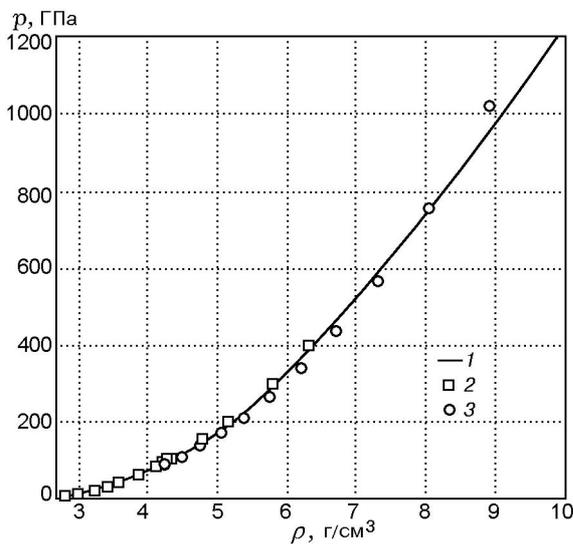


Рис. 2. Нормальные изотермы алюминия:

1 — расчет по УРС данной работы, 2 — нормальная изотерма, рекомендованная в [21], 3 — расчет по УРС [22]

ным данным (ρ_0, A, Z, \dots) или автоматически насчитываются на стадии подбора параметров (T_F, γ_{eT} , коэффициенты сплайна, ...). Значения подгоночных параметров определяются при поиске минимума функционала сред-

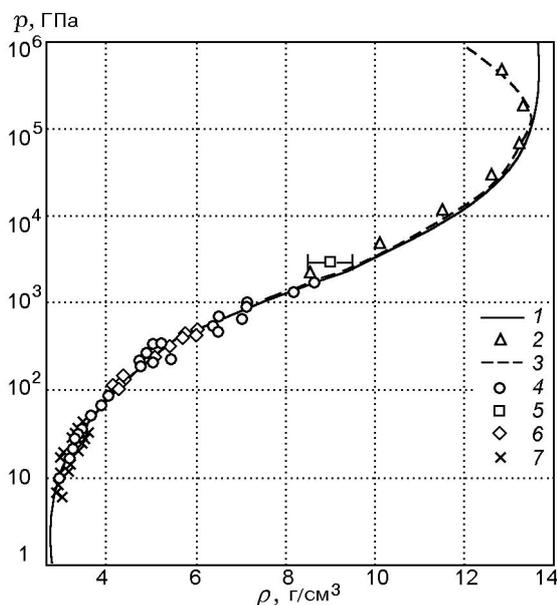


Рис. 3. Ударные адиабаты сплошного алюминия ($\rho_0 = 2.71 \text{ г/см}^3$):

расчет: 1 — УРС данной работы, 2 — модель КСМ [23], 3 — модель ТФПК [7, 17]; экспериментальные данные: 4 — [12], 5 — [13], 6 — [14, 15], 7 — [11]

неквадратичного отклонения термодинамических величин, рассчитанных по уравнениям состояния, от соответствующих экспериментальных данных или данных, полученных с помощью теоретических моделей. Подобранные параметры уравнения состояния (УРС) алюминия приведены в табл. 1. На рис. 1 представлены расчетные и экспериментальные данные по изобарной теплоемкости и тепловому расширению алюминия. Экспериментальные данные [18, 19] по тепловому расширению до температуры плавления алюминия, а также экспериментальные данные для $c_p(T)$ из [18, 20] хорошо описываются расчетами по УРС данной работы. На рис. 2 представлены нормальные изотермы ($T = 293 \text{ К}$): рассчитанная по УРС данной работы и рекомендованная в [21]. Для сравнения на рис. 2 приведена также нормальная изотерма, рассчитанная по УРС [22]. С повышением давления нормальная изотерма, рассчитанная по УРС данной работы, асимптотически приближается к расчетам по модели ТФП [7], при $p \gg 3 \cdot 10^4 \text{ ГПа}$ они практически совпадают. На рис. 3 показаны ударные адиабаты сплошного алюминия, рассчитанные по УРС данной работы, квантово-статистической модели [23], ТФПК [7, 17]. Там же приведены и экспериментальные данные [11–15]. В экспери-

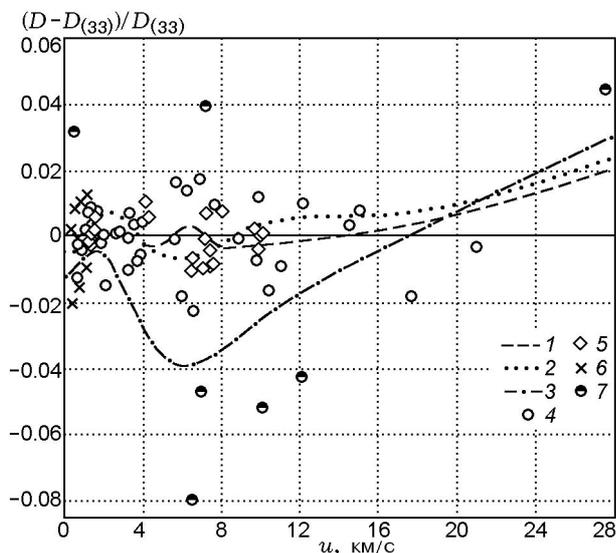


Рис. 4. Относительные отклонения расчетных и экспериментальных значений скорости ударной волны от зависимости $D(u)$, рассчитанной по УРС данной работы:

расчет: 1 — по зависимости $D(u)$ из [12], 2 — [24], 3 — [25]; экспериментальные данные: 4 — [12], 5 — [14, 15], 6 — [11]; 7 — данные из [11, 12, 13], не использовавшиеся при подборе параметров зависимости $D(u)$

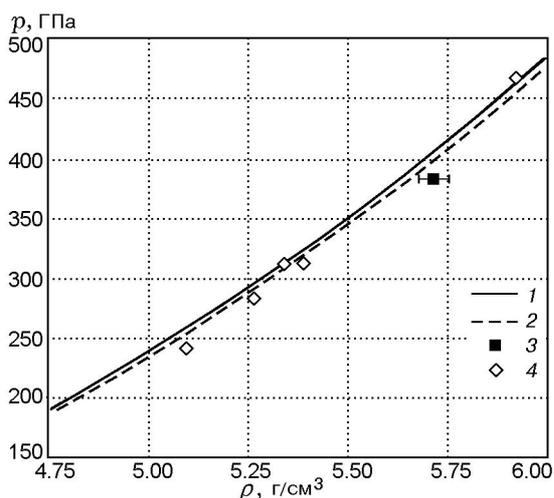


Рис. 5. Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах сплошного охлажденного алюминия в диапазоне $4.75 \leq \rho \leq 6 \text{ г/см}^3$:

расчет по УРС данной работы для двух состояний алюминия: 1 — $T = 293 \text{ К}$, $p = 1 \text{ атм}$, 2 — $T = 10 \text{ К}$, $p = 1 \text{ атм}$; экспериментальные данные для охлажденного алюминия: 3 — $T = 10 \text{ К}$ [26], 4 — $T = 22 \text{ К}$ [14]

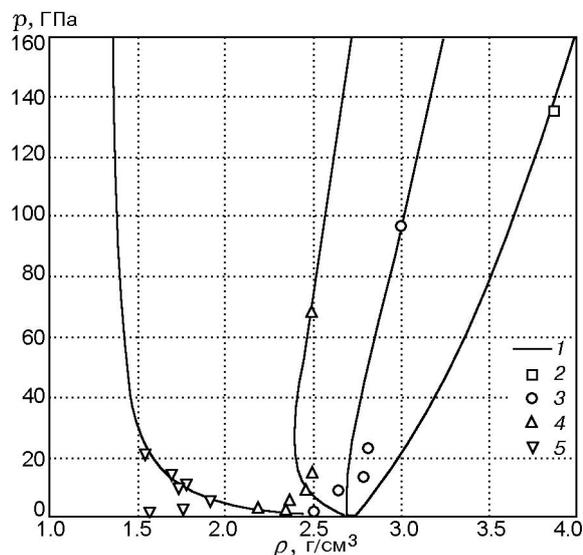


Рис. 6. Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах пористого алюминия:

1 — расчет по уравнению состояния данной работы; эксперимент [12]: 2 — $\rho_{00} = 1.9 \text{ г/см}^3$, 3 — $\rho_{00} = 1.3 \text{ г/см}^3$, 4 — $\rho_{00} = 0.91 \text{ г/см}^3$, 5 — $\rho_{00} = 0.34 \text{ г/см}^3$

ментально исследованной области расчеты по УРС данной работы хорошо согласуются с данными [11–15], в области больших давлений до плотности $\rho \approx 13.5 \text{ г/см}^3$ согласуются с расчетами по квантово-статистической модели КСМ и модели ТФПК. Результаты сравнения описания экспериментальных данных расчетами по соотношениям $D(u)$ иллюстрирует рис. 4. На оси ординат, обозначенной $(D - D(33))/D(33)$, приведены значения относительных отклонений скорости фронта ударной волны D , измеренной в эксперименте или рассчитанной по УРС [24] либо по соотношениям $D(u)$ [12, 25], от скорости $D(33)$, вычисленной по зависимости (33). Представленные на рис. 4 результаты показывают, что в среднем лучшее описание экспериментальных данных достигается зависимостью (33). На рис. 5 приведены ударные адиабаты сплошного алюминия, рассчитанные по УРС данной работы в диапазоне $4.75 \leq \rho \leq 6.5 \text{ г/см}^3$ для двух состояний исходного алюминия: $T = 293 \text{ К}$, $p = 1 \text{ атм}$ и $T = 10 \text{ К}$, $p = 1 \text{ атм}$. Там же приведены взятые из [14, 26] экспериментальные данные по исследованию ударных адиабат сплошного охлажденного алюминия. Рис. 6 демонстрирует положение рассчитанных по УРС данной работы ударных адиабат алюминия с начальной плот-

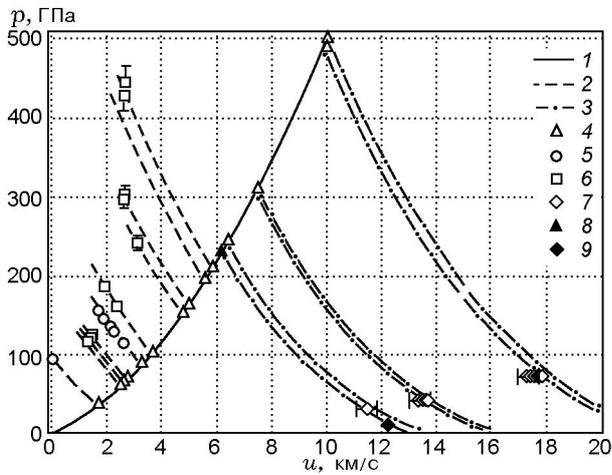


Рис. 7. Зависимости давления от массовой скорости на ударных адиабатах и изоэнтропах расширения сплошного алюминия:

расчет по уравнению состояния данной работы: 1 — ударная адиабата, 2 — ударные адиабаты повторного сжатия, 3 — изоэнтропы расширения; экспериментальные данные: 4 — начальные состояния за фронтом первой ударной волны для повторных адиабат и изоэнтроп расширения [12, 15, 27], 5, 6 — состояния на ударных адиабатах повторного сжатия [12, 27], 7 — состояния на изоэнтропах расширения [15], 8, 9 — состояния на ударной адиабате и на изоэнтропе, приведенные в табл. 2

Таблица 2

Параметры на адиабате расширения ударно-сжатого сплошного алюминия

Образец, алюминий АД-1			Преграда	
ρ_0 , г/см ³	p , ГПа	u , км/с	материал	D , км/с
2.71	229.71	6.21	Алюминий ($\rho_0 = 2.71$ г/см ³)	13.65
2.71	13.64	12.26 ± 0.12	Аэрогель, SiO ₂ ($\rho_{00} = 0.08$ г/см ³)	13.91

ностью $\rho_{00} = 1.9, 1.31, 0.91, 0.34$ г/см³. Расчеты ударных адиабат хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Хорошее описание нашим уравнением состояния экспериментальных данных, полученных при исследовании повторных (вторых) ударных адиабат [12, 27] и адиабат расширения [15] алюминия, иллюстрирует рис. 7. На этом же рисунке представлены полученные авторами данной работы экспериментальные и расчетные данные о положении адиабаты расширения алюминия (АД-1) в аэрогель (SiO₂) с

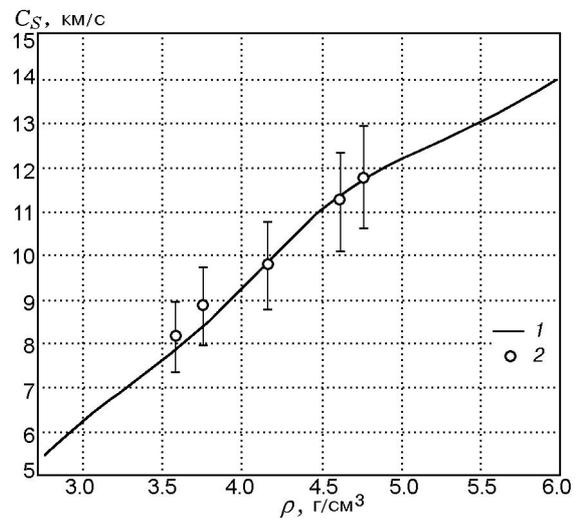


Рис. 8. Зависимость изоэнтропической скорости звука в алюминии от плотности на ударной адиабате:

1 — расчет по УРС данной работы, 2 — эксперимент [12]

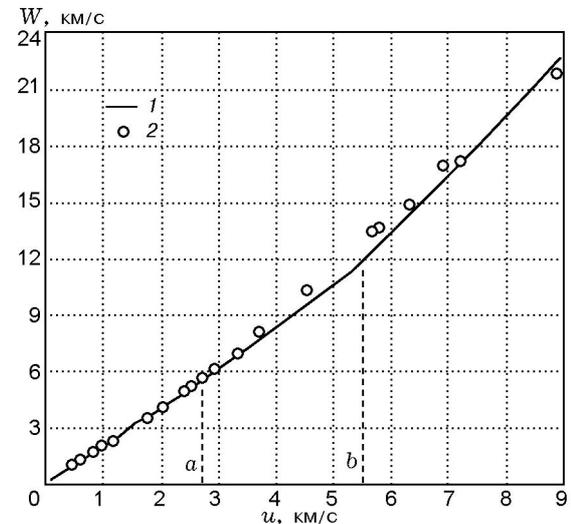


Рис. 9. Зависимости скорости разлета сплошного алюминия в воздух от массовой скорости на ударной адиабате:

1 — расчет по УРС данной работы, 2 — эксперимент [12]; a — состояние на ударной адиабате, при разгрузке из которого в воздух алюминий имеет температуру плавления, b — температуру кипения

плотностью 0.08 г/см³ из состояния на ударной адиабате, соответствующего $p = 229.71$ ГПа. В опыте использовался полусферический генератор ударных волн МЗ-4 [28]. Скорость фронта ударной волны в экране (алюминий АД-1) ге-

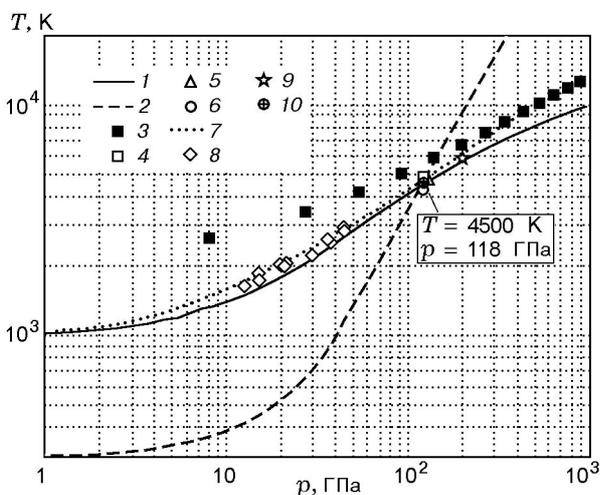


Рис. 10. Зависимости температуры от давления на ударной адиабате и на линии плавления алюминия:

расчет по УРС данной работы: 1 — на линии плавления, 2 — на ударной адиабате; расчет по другим УРС: 3 — ТФПК [7, 17], 4 — [32] (начало плавления), 5 — [22] (начало плавления), 6 — [33], 7 — расчет линии плавления по аппроксимационной зависимости из [34]; 8–10 — экспериментальные данные на линии плавления, приведенные в [34]

нератора ударных волн определена с использованием электроконтактных датчиков.

Измерение средней скорости ударной волны в аэрогеле выполнено с использованием кварц-полимерного световода с диаметром сердцевины 400 мкм. Излучение фронта удар-

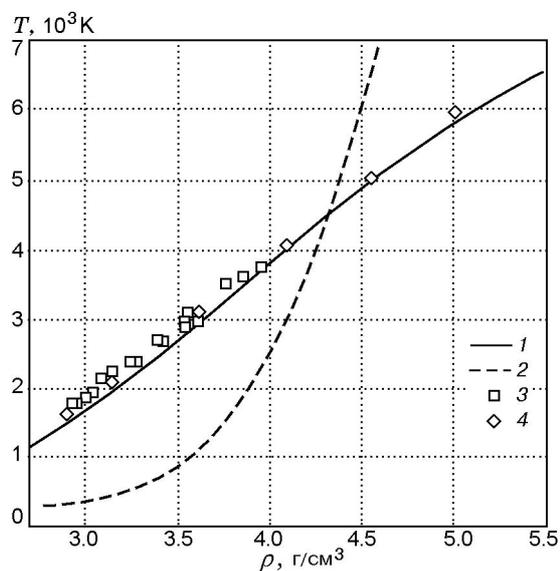


Рис. 11. Зависимости температуры от плотности на ударной адиабате и на линии плавления алюминия:

расчет по УРС данной работы: 1 — на линии плавления, 2 — на ударной адиабате; 3 — экспериментальные данные на линии плавления, приведенные в [40]; 4 — расчетные данные линии плавления из [40]

ной волны направлялось в высокоскоростной пирометр, регистрирующий излучение на длинах волн 406, 498, 550 и 600 нм. При измерении скорости ударной волны использовался эффект отсечки излучения при выходе ударной волны на торец световода. Массовая ско-

Таблица 3

Параметры критической точки и точки кипения алюминия

Параметры точки кипения		Параметры критической точки			
$T_{\text{кип}}, \text{K}$	$\rho_{\text{кип}}, \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	$\rho_{\text{кр}}, \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	$T_{\text{кр}}, \text{K}$	$p_{\text{кр}}, \text{ГПа}$	$S_{\text{кр}}, \frac{\text{кДж}}{\text{г} \cdot \text{град}}$
Данные из разных источников					
2333 [16]	—	0.4027 [38]	4744 [38]	0.1717 [38]	—
2740 [35]		—	8550 [38]	—	—
2793 [36]		0.5996 [38]	7400 [38]	0.4154 [38]	—
2593 ± 50 [37]		—	7740 [38]	—	—
—		0.6918 [38]	7151 [38]	0.5458 [38]	—
—		—	8480 [38]	—	—
—		0.64 [39]	8000 [39]	0.447 [39]	0.005205 [39]
Результаты расчета по УРС данной работы					
2590	2.16	0.6599	7917	0.4674	0.005167

рость u определена с использованием соотношения $D = -0.03388 + 1.13734u$ ($2 < u < 12$ км/с), полученного в результате аппроксимации экспериментальных данных из работ [12, 29–31] для аэрогелей с начальной плотностью $0.008 \div 0.36$ г/см³. Экспериментальные данные для этой адиабаты приведены в табл. 2.

Зависимость изэнтропической скорости звука в ударно-сжатом алюминии от плотности, рассчитанная по УРС данной работы, и экспериментальные данные из [12] приведены на рис. 8. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными в пределах ошибки. Рассчитанная по УРС данной работы зависимость скорости разлета ударно-сжатого сплошного алюминия в воздух от массовой скорости на ударной адиабате показана на рис. 9. Там же приведены и экспериментальные данные из [12]. Точками a и b на рис. 9 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). Для повышения точности описания экспериментальных данных необходимо учесть изменение термодинамических функций при плавлении.

На рис. 10, 11 представлены 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 $p \approx 118$ ГПа, $T \approx 4500$ К, $\rho \approx 4.32$ г/см³. На рис. 10 также приведены результаты расчетов по другим уравнениям состояния параметров плавления на ударной адиабате [22, 32, 33]. Кроме того, приведены экспериментальные данные, полученные на линии плавления, и результаты расчетов по зависимости $T(p)$ из [34], аппроксимирующие экспериментальные данные. Последние на $5 \div 10$ % больше значений температуры, рассчитанных по УРС данной работы. Аналогичные отклонения наблюдаются и для приведенной на рис. 11 зависимости $T(\rho)$. Возможно, это является следствием неточности используемой нами модели плавления, основанной на законе Линдемана. В табл. 3 представлены данные о параметрах критической точки и точки кипения алюминия. Параметры критической точки, рассчитанные по УРС данной работы, согласуются со средними значениями этих параметров, опубликованными в разных источниках.

Приведенные в статье результаты сравнения расчетов по уравнению состояния с экспериментальными данными и расчетами по другим УРС показывают, что в данном классе моделей (не учитывающих плавление и полиморфные фазовые переходы) разработанное уравнение состояния хорошо описывает экспериментальные данные.

ЛИТЕРАТУРА

1. 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.
2. Гударенко Л. Ф., Елисеев Г. М., Жеребцов В. А., Леонова Н. И., Сураева З. В., Тимонькина А. В. Обеспечение уравнениями состояния программ математического отделения ВНИИЭФ // Хим. физика. 1995. Т. 14, № 1. С. 40–46.
3. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
4. Бушман А. В., Фортов В. Е. Модели уравнения состояния вещества // Успехи физ. наук. 1983. Т. 140, № 2. С. 177–232.
5. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
6. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. К. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
7. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. М., 1975. (Препринт / АН СССР. Ин-т прикл. математики; № 35).
8. 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).
9. Burakovsky L., Preston D. L. Analytic model of the Grüneisen parameter all densities // J. Phys. and Chem. of Solids. 2004. V. 65. P. 1581–1587.
10. Grover R. Liquid metal equation of state based on scaling // Chem. Phys. 1971. V. 55, N 7. P. 3435–3441.
11. LASL Shock Hugoniot Data. Berkeley; Los Angeles; London: Univ. of California Press, 1980. P. 658.
12. 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.

13. Ragan III C. E. Shock-wave experiments at threefold compression // *Phys. Rev. A*. 1984. V. 29, N 3. P. 1391–1402.
14. 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. V. 94, N 7. P. 4420–4431.
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. Appl. Phys.* 2005. V. 97. P. 073514-1–073514-14.
16. Gschneider K. A. Physical properties and interrelationships of metallic and semimetallic elements // *Solid State Phys.* 1964. V. 16. P. 275–426.
17. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества. М., 1978. (Препринт / АН СССР. Ин-т прикл. математики; № 59).
18. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989.
19. Новикова С. И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974.
20. Физические величины: Справочник / Под ред. И. С. Григорьевой, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
21. Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е., Кузьменков Е. А. Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов // ПТМФ. 1987. № 1.
22. 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.* 1998. V. 60, N 14. P. 1414–1417.
23. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Квантово-статистические адиабаты пористых веществ // *Мат. моделирование*. 1998. Т. 10, № 7. С. 111–123.
24. 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.
25. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В., Фунтиков А. И. Главные ударные адиабаты 10 металлов // *Мат. моделирование*. 2002. Т. 14, № 10. С. 27–42.
26. Белов С. И., Борисков Г. В., Быков А. И., Илькаев Р. И., Лукьянов Н. Б., Матвеев А. Я., Михайлова О. Л., Селемир В. Д., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф., Трусков И. П., Урлин В. Д., Фортков В. Е., Шуйкин А. Н. Ударно-волновое сжатие твердого дейтерия // *Письма в ЖЭТФ*. 2002. Т. 76, вып. 7. С. 508–510.
27. 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. V. 93, N 1. P. 304–310.
28. Альтшулер Л. В., Трунин Р. Ф., Крупников К. К., Панов Н. В. Взрывные экспериментальные устройства для исследования сжатия веществ в ударных волнах // *Успехи физ. наук*. 1996. Т. 166, № 5. С. 575–581.
29. Грязнов В. К., Николаев Д. Н., Терновой В. Я., Фортков В. Е., Филимонов А. С., Килер Н. Генерация неидеальной плазмы путем ударно-волнового сжатия высокопористого аэрогеля // *Хим. физика*. 1988. Т. 17, № 2. С. 33–37.
30. Vildanov V. G., Gorshkov M. M., Slobodnjukov V. M., Rushkovan E. N. Shock compression of low initial quartz at pressures up to 100 Gpa // *Shock Compression of Condensed Matter*. 1995. Seattle, Washington: Proc. Amer. Phys. Soc. Topical Group, August 13–18 1996. P. 121–124.
31. Nikolaev D. N., Fortov V. E., Filimonov A. S., Kvitov S. V., Ternovoi V. Ya. SiO₂-aerogel properties in the energy up to 65 kJ/g // *Shock Compression of Condensed Matter*, 1999. NY: Amer. Inst. of Phys., 2000. P. 121–124.
32. Chengda Dai, Hua Tan, Huayun Geng. Model for assessing the melting on hugoniots of metals: Al, Pb, Cu, Mo, Fe, and U // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 92, N 9. P. 5019–5026.
33. Медведев А. Б. Модификация модели Ван-дер-Ваальса для плотных состояний // *Ударные волны и экстремальные состояния вещества* / Под ред. В. Е. Форткова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. М.: Наука, 2000. С. 315–341.
34. 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. V. 68. P. 104103-1–104103-12.
35. Элементы: Справочник / Под ред. Дж. Эмсли. М.: Мир, 1993.
36. Свойства элементов: Справочник / Под ред. М. Е. Дрица. М.: Металлургия, 1985.
37. Чиркин В. С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат, 1968.
38. Ohse R. W., von Tippelskirch H. The critical constants of the elements and of some refractory materials with high critical temperatures (A review) // *High Temperatures-High Pressures*. 1977. V. 9. P. 367–385.
39. Фортков В. Е., Дремин А. Н., Леонтьев А. А. Оценка параметров критической точки // *Теплофизика высоких температур*. 1975. Т. 13, № 5. С. 1072–1080.

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. V. 67. P. 094107-1–094107-9.

*Поступила в редакцию 1/VIII 2006 г.,
в окончательном варианте — 20/III 2007 г.*
