

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ НЕКОТОРЫХ МЕТАЛЛОВ

В.Ф.Куропатенко, И.С.Минаева

В работе приводится математическая форма атомного уравнения состояния, применимого для описания свойств веществ в широкой области плотностей и давлений; предлагается, обосновывается и обсуждается форма коэффициента Гринайзена; приводятся результаты сравнения с экспериментальными данными, с теоретическими данными, полученными по модели Томаса-Ферми с поправками и с другими уравнениями состояния. Излагается способ определения численных значений параметров уравнения состояния с помощью метода скользящего допущения.

Уравнение состояния вещества является важной составной частью математических моделей сплошных сред, применяемых для описания широкого класса физических процессов. Большинство уравнений состояния с удовлетворительной точностью описывает поведение веществ в относительно узкой области изменения термодинамических величин, не имея физического смысла за ее пределами. К таким можно отнести уравнения состояния из [1], [2]. Есть ряд уравнений состояния, которые вне области применимости дают физически правдоподобные результаты [3]-[7].

При построении уравнения состояния, то есть при выборе и обосновании зависимостей между термодинамическими величинами и при определении численных значений величин, входящих в эти зависимости, возникает необходимость решать задачу оптимизации с противоречащими друг другу требованиями. Так, повышение точности и расширение области применимости уравнения состояния приводит

к его усложнению и к удорожанию стоимости математических экспериментов, проводимых с использованием этого уравнения состояния.

Широкое распространение получило так называемое двулучное уравнение состояния [8]

$$P = P_x(\varphi) + P_T, \quad E = E_x(\varphi) + E_T, \quad (1)$$

где

$$P_x = \frac{\rho_{ок} c_{ок}^2}{n} (\delta^n - 1),$$

$$P_T = \Gamma \varphi E_T, \quad \Gamma = const.$$

$\rho_{ок}$, $c_{ок}$ - плотность и скорость звука кристаллического вещества, $\delta = \varphi / \rho_{ок}$, P_x и E_x связаны уравнением

$$P_x(\varphi) = \varphi^2 \frac{dE_x}{d\varphi}. \quad (2)$$

Это уравнение состояния применимо для описания свойств конденсированного состояния вещества вблизи ударной адиабаты сплошного вещества и при не слишком высоких давлениях. При моделировании движений конденсированных сред его удобнее применять в виде зависимости P от φ и E

$$P = \Gamma \varphi \left(E + \frac{c_{ок}^2}{n-1} \right) - \frac{\Gamma+1}{n} \rho_{ок} c_{ок}^2 + \frac{n\Gamma+1}{n(n-1)} \rho_{ок} c_{ок}^2 \delta^n. \quad (3)$$

Обозначим затраты времени ЭВМ, необходимые для вычисления P по заданным φ и E с помощью (3) через t_0 и будем для сравнения измерять затраты времени для любого уравнения состояния в единицах t_0 .

Затраты уравнения состояния из [5] вида $P = P(\varphi, E)$, $T = T(\varphi, E)$, имеющего область применимости $0 \leq \delta \leq 4+4,5$ и $-0,05 \leq \Pi \leq 15+20$, где $\Pi = P / \rho_{ок} c_{ок}^2$, равны $3 \cdot t_0$.

Затраты уравнения состояния из [3], имеющего область применимости $0 \leq \delta \leq 6+8$ и $0 \leq \Pi \leq 10^3$ равны $6 \cdot t_0$.

Затраты уравнения состояния из [4] вида $P = P(\varphi, T)$, $E = E(\varphi, T)$ с областью применимости $0 \leq \delta \leq 4,5+5$ и $-0,05 \leq \Pi \leq 20+25$ равны $10 \cdot t_0$.

Наконец, затраты уравнения состояния с электронными членами из [6] и ядерной компонентой из [9] равны $\sim 300 t_0$.

Хотя указанные выше области применимости уравнений состояния указаны очень приблизительно, видно, что с расширением области

применимости уравнения состояния растут и его затраты. В связи с этим задача сокращения затрат уравнения состояния при одновременном расширении области его применимости будет актуальной в течение многих лет.

Рассмотрим уравнение состояния вида (I) с зависимостью $\Gamma(E)$. Поскольку $E = E(\varphi, T)$, то $\Gamma = \Gamma(E(\varphi, T))$, и, таким образом, рассматриваемое уравнение состояния принадлежит к достаточно широкому классу.

Возьмем зависимость $\Gamma(E)$ в виде

$$\Gamma(E) = \Gamma_i + \sum_{k=1}^5 A_{ik} x^k, \quad (4)$$

где

$$x = \frac{b_{i1}E - b_{i2}E_{i*}}{b_{i3} + b_{i4}E + b_{i5}E_{i*}}, \quad (5)$$

$A_{ik} = \text{const}$, $b_{i\ell} = \text{const}$, $i = 1, 2 \dots 4$, $\ell = 1, 2 \dots 5$,

$E_{i*} = \text{const}$. Качественная зависимость Γ от $\log E$ приведена на рис. I. Величины E_{i*} - граничные значения энергии, при которых происходит переход от формулы с номером i к формуле с номером $i+1$. Переход от одной формулы к другой происходит при сохранении непрерывности $\Gamma(E)$ и производной $\frac{d\Gamma}{dE}$. При $E \geq E_5$, $\Gamma = \Gamma_\infty = \text{const}$.

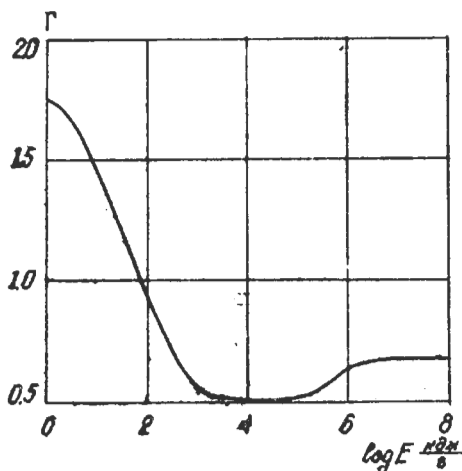


Рис. I. Зависимость Γ от $\log E$ для Γ_e

Потенциальные составляющие давления и внутренней энергии возьмем в виде

$$P_x(\delta) = \rho_{ок} c_{ок}^2 \sum_{l=0}^6 c_{il} \delta^l \quad \text{при } \delta < \delta_*, \quad (6)$$

где $l = 1, 2$, δ_* - нижняя граница применимости модели ТФП для холодного вещества. При $\delta \geq \delta_*$ P_x возьмем в виде

$$P_x = Z^{10/3} (\kappa \delta^\alpha - l \delta^\beta), \quad (7)$$

где Z - заряд, κ, l, α, β - параметры уравнения состояния. Зависимость $E_x(\delta)$ для (6) и (7) получается после интегрирования (2). Численные значения ряда параметров определяются из условий непрерывности функций и первых производных при переходе от одной формулы к другой.

Это сокращает количество зависимых параметров уравнения состояния до 44. Для определения численных значений этих параметров нами использовались следующие экспериментальные данные и данные, полученные с помощью теоретических моделей:

- данные по ударному сжатию сплошных и пористых образцов в том же виде и объеме, как в [4];
- зависимости $P_x(\delta)$, $E_x(\delta)$ и ударные адиабаты, полученные по модели ТФП [6], [9];
- значения $\rho_{ок}$, $c_{ок}$, теплоты сублимации Q и значение коэффициента Грнбайзена Γ_0 при нормальных условиях.

При определении значений параметров использовался метод скользящего допуска [10], применимый к задачам нелинейного программирования с функцией качества, содержащей сумму квадратичных отклонений безразмерных значений давления, рассчитанных по уравнению состояния по ρ и E , от заданных значений давления, соответствующим тем же самым ρ и E , а также данные по теплоте сублимации и данные по тепловому расширению при постоянном давлении.

На рис. 2 приведены экспериментальные данные по ударному сжатию Al до давлений 10^3 гпа, а также ударные адиабаты, полученные по данному уравнению состояния - по уравнению состояния из [4]. Аналогичные данные для Fe приведены на рис. 3.

На рис. 4 и 5 приводятся ударные адиабаты для Al и Fe , полученные по данному уравнению состояния, по уравнению состояния из [6], [9] в области высоких давлений.

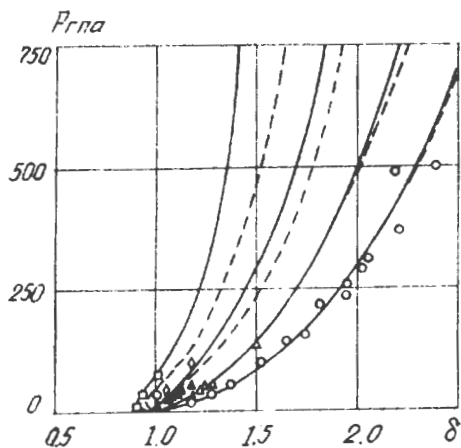


Рис. 2. Ударные адиабаты для сплошного и пористых образцов
 1 - $\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$,
 2 - $\rho_0 = 1,39 \text{ г/см}^3$,
 3 - $\rho_0 = 1,35 \text{ г/см}^3$,
 4 - $\rho_0 = 0,91 \text{ г/см}^3$.
 — Уравнение состояния данной работы
 --- Уравнение состояния из [4]

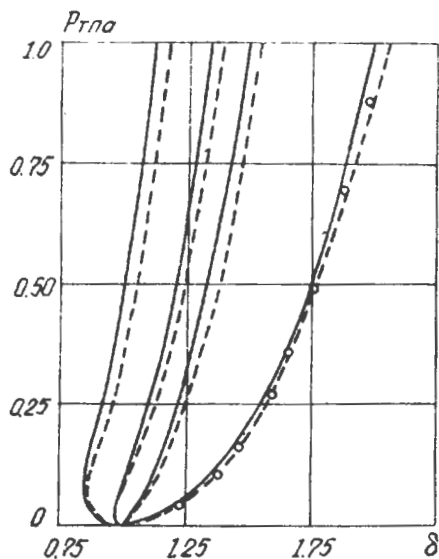


Рис. 3. Ударные адиабаты для сплошного и пористых образцов
 1 - $\rho_0 = 7,85 \text{ г/см}^3$,
 2 - $\rho_0 = 4,29 \text{ г/см}^3$,
 3 - $\rho_0 = 3,552 \text{ г/см}^3$,
 4 - $\rho_0 = 2,707 \text{ г/см}^3$.
 — Уравнение состояния данной работы
 --- Уравнение состояния из [4]

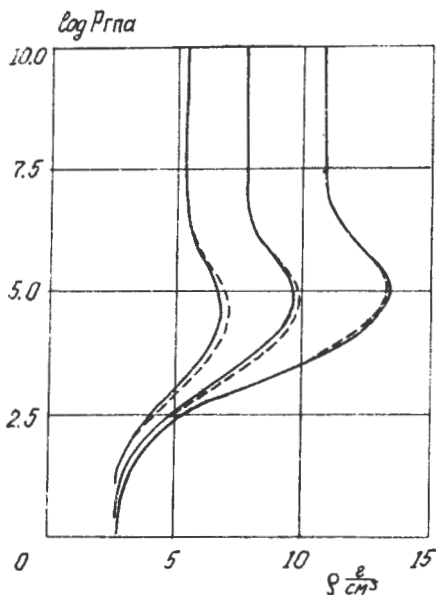


Рис. 4. Ударные адиабаты для сплошного и пористых образцов
 1 - $\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$,
 2 - $\rho_0 = 1,93 \text{ г/см}^3$,
 3 - $\rho_0 = 1,35 \text{ г/см}^3$.
 — Уравнение состояния данной работы
 - - - Уравнение состояния из [6], [9]

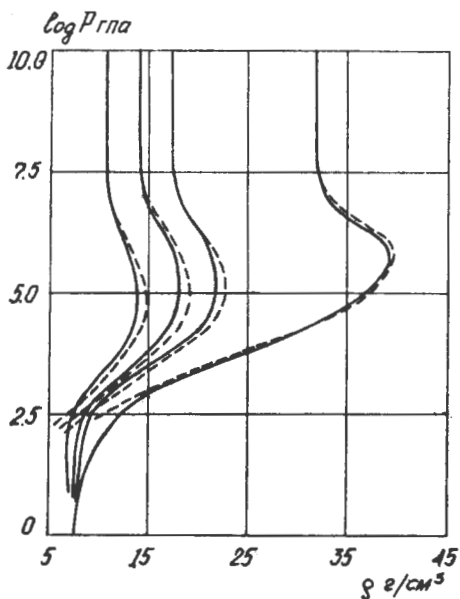


Рис. 5. Ударные адиабаты для сплошного и пористых образцов
 1 - $\rho_0 = 7,85 \text{ г/см}^3$,
 2 - $\rho_0 = 4,29 \text{ г/см}^3$,
 3 - $\rho_0 = 3,552 \text{ г/см}^3$,
 4 - $\rho_0 = 2,707 \text{ г/см}^3$.
 — Уравнение состояния данной работы
 - - - Уравнение состояния из [6], [9]

Проведенное сравнение подтверждает удовлетворительную точность данного уравнения состояния в весьма широком диапазоне изменения δ и Π . Затраты времени ЭВМ на вычисление P по ρ и E при одном обращении к этому уравнению состояния составляют t_0 . Таким образом, данное уравнение состояния имеет широкую область применимости и в то же время весьма экономично.

1. Вукалович М.П., Ривнин С.Л., Александров А.А. Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара. - М.: Изд-во стандартов, 1969.
2. Мейсон Э., Сперлинг Т. Вирьяльное уравнение состояния. - М.: Мир, 1972.
3. Коваленко Г.В., Сапожников А.Т. Табличное уравнение состояния воды. - Вопросы атомной науки и техники, сер. мет. и прогр. числ. реш. задач матфизики, 1979, вып. 4(6), 40.
- 13 4. Сапожников А.Т., Першина А.В. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов в широком диапазоне плотностей и температур. - Вопросы атомной науки и техники, сер. мет. и прогр. числ. реш. задач матфизики, 1979, вып. 4(6), 47.
5. Куропатенко В.Ф. Уравнения состояния некоторых веществ/Докл. на У Всесоюз. семинаре по моделям мех. сплошной средн. - Рига, 1979.
- 14 6. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. - М.: ИИМ АН СССР, 1975, Препринт № 35.
7. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Применение модифицированной модели Хартри-Фона-Слетера для расчета уравнений состояния вещества. - Вопросы атомной науки и техники, сер. мет. и прогр. числ. реш. задач матфизики, 1979, вып. 4(6), 27.
8. Зельдович Я.Б., Райзер Е.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. - М.: Наука, 1966.
- 41 9. Кошнев В.П. О термодинамике ядер одноатомного вещества. - В сб.: Числ. мет. механики спл. средн, Новосибирск, 1977, т. 8, № 6.

10. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. - М.: Мир, 1975.

Поступила в редакцию
30.10.1981.