

Большая часть работ, о которых была речь выше, опубликована в сборниках "Вопросы атомной науки и техники", серия: "Математическое моделирование физических процессов".

По-видимому, следует сказать, что этим не исчерпывается полный перечень трехмерных программ. На разной стадии разработок находятся еще несколько интересных и важных проектов, однако, они еще не вышли на уровень производственного счета. Нашей целью является создать для решения одной и той же трехмерной задачи как минимум две независимые методики расчета. Такой цели мы добились в области одномерного и двумерного счета, и очень часто это помогало нам избежать многих неприятностей. Совпадение или несовпадение результатов решения одной и той же задачи по различным методикам дает либо надежду, что полученный результат расположен недалеко от истинного, либо показывает меру неопределенности математического расчета.

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ В МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ МЕХАНИКИ И ФИЗИКИ

© В.Ф. Куропатенко

1. Среда и вещество. Уравнения состояния. Законы сохранения массы, количества движения и энергии лежат в основе математических моделей в механике сплошных сред, термодинамике, оптике, электродинамике, физической химии и т.д. Однако, законы сохранения, записываемые чаще всего в форме нелинейных уравнений с частными производными, не дают замкнутой системы уравнений. Нужны еще зависимости между входящими в уравнения величинами. Эти зависимости получаются либо из физических экспериментов, либо из математических моделей, описывающих физические процессы на другом уровне их детализации. К таким зависимостям относятся уравнения состояния вещества.

Для решения многих научно-технических и технологических задач в соответствие с принятой "математической технологией", создаются различные проблемно-ориентированные пакеты прикладных программ, которые предъявляют близкие требования к описанию теплофизических свойств материалов. Существует прямая связь между методами решения систем законов сохранения и уравнениями состояния веществ. Проблемы создания *уравнений состояния* (УРС), исследования их свойств и организации общих для различных пакетов прикладных программ библиотек УРС не зависят от размерности течений среды. Это является основой универсальности уравнений состояния. Однако, возможности библиотек УРС должны быть достаточно широкими, чтобы они могли использоваться различными методами.

Характеристики сплошной среды, как и характеристики вещества, носят статистический характер и выражают средние свойства ансамблей микрочастиц. Так температура и давление газа пропорциональны средней кинетической энергии его молекул. Связь между характеристиками сплошной среды —

термодинамическими функциями устанавливается термодинамикой. Эти связи называются уравнениями состояния термодинамической системы (сплошной среды или вещества). Поскольку термодинамика изучает свойства равновесных систем, то УРС не могут описывать изменение состояния вещества со временем. Это ограничение носит принципиальный характер.

В течение второй половины XIX и первой половины XX века были построены уравнения состояния газов, жидкостей и твердых тел, описывающие их свойства, как правило, в относительно узкой области изменения термодинамических функций. Бурное развитие математического моделирования в последние 20 лет потребовало построения новых более точных УРС, описывающих свойства вещества в широком диапазоне изменения термодинамических функций. В простых математических моделях свойства сплошной среды отождествляются со свойствами вещества. В более сложных моделях среда может состоять из нескольких компонент (смесь разных веществ, вещество и поры или трещины и т.д.). В этом случае свойства каждой компоненты описываются уравнениями состояния вещества, а свойства среды выражаются через свойства компонент с помощью уравнений осреднения. Свойства среды и свойства составляющих ее компонент оказываются в этом случае различными. Это различие должно учитываться в математической модели.

Комплекс программ ВОЛНА. Набор свойств вещества, которые необходимо включать в библиотеки уравнений состояния, продемонстрируем на примере библиотеки УРС комплекса программ ВОЛНА [1]. Принятая здесь математическая модель описывает такие неустановившиеся движения сжимаемых идеальных и неидеальных сред, в которых свойства среды могут меняться в широком диапазоне от упругих свойств при низких температурах до свойств фотонного газа при высоких температурах. С одинаковой точностью описываются адиабатическая сжимаемость, теплопроводность, фазовые переходы (плавление, испарение, полиморфизм), детонация, упругость, пластичность, хрупкость, химические реакции в некоторых реагирующих средах, разрушение твердых тел, пористость, трещиноватость твердых тел, электропроводимость, магнитные и электрические свойства. Если свойства среды определяются уравнениями не эволюционного типа, то они относятся к уравнениям состояния вещества. Неравновесные свойства описываются уравнениями эволюционного типа, дополняющими систему законов сохранения. Для численного интегрирования систем эволюционных уравнений разработан неоднородный разностный метод, выделяющий в решении существенные разрывы: сильные, слабые, контактные, линии фазовых переходов и т.д. Количество разрывов в моделируемой системе (конструкции) не ограничено. Количество разрывов в системе также не ограничено. При взаимодействии разрывов рассчитывается распад произвольного разрыва. В каждой точке системы происходит анализ полученного решения и при возникновении необходимых условий происходит расщепление ударных волн и волн разрежения.

Библиотека теплофизических свойств комплекса ВОЛНА обеспечивает для всех фаз расчет давления $P(V,E)$, температуры $T(V,E)$, коэффициентов теплопроводности $\kappa(V,T)$, вязкости $\nu(V,E)$, электропроводности $\sigma(V,T)$. Для фаз твердого тела рассчитывают модуль сдвига $G(V,T)$, коэффициент Пуассона $\mu(V,E)$, предел упругости, поверхность текучести, динамическую прочность и т.д. Теплоемкость, квадрат скорости звука и производные $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_E$, $\left(\frac{\partial P}{\partial E}\right)_V$, $\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T$, $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_E$, $\left(\frac{\partial T}{\partial E}\right)_V$, $\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)$, $\left(\frac{\partial^2 P}{\partial E^2}\right)$, $\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V \partial E}\right)$ могут для всех фаз либо задаваться в виде

аналитических выражений, либо рассчитываться с помощью численного дифференцирования. Вместе с аргументами V, E, P указывается заказ, какие свойства необходимо рассчитать.

Расчет величин по уравнениям состояния при численном решении нестационарных задач механики сплошной среды достаточно трудоемок и составляет большую часть в общем объеме вычислений. Поэтому при создании программ УРС большое внимание следует обращать на экономичность. В конкретных задачах механики сплошной среды все перечисленные свойства не проявляются одновременно. В связи с этим каждая из программ УРС разбивается на модули, позволяющие компилировать для каждой задачи свою систему УРС.

При описании фазовых переходов зависимости между термодинамическими переменными задаются для каждой фазы. Выбор необходимого УРС обеспечивается заданием номера фазы при обращении к УРС. Одновременно с термодинамическими функциями рассчитывается контрольная функция $F(V, E)$ такая, что $F \geq 0$, если точка V, E принадлежит фазе, и $F < 0$ — если точка в пространстве термодинамических переменных вышла за пределы фазы. В этом случае в прикладной программе проводится анализ с целью смены номера фазы и перехода из одной фазы в другую без потери точности. Особенности, возникающие при расчете течений сред с фазовыми переходами, изложены в [2].

Разные физические модели требуют знания разных теплофизических свойств. Однако, есть величины, знание которых нужно в каждой модели независимо от диапазона изменения термодинамических величин. Это прежде всего давление P . В газах, в жидкостях и плазме, находящихся в равновесном состоянии, давление является единственной поверхностной силой. В твердых телах дело обстоит сложнее, поскольку поверхностные силы зависят от ориентации площадок. Однако, несмотря на тензорный характер напряжений и деформаций в твердом теле связь между P и удельным объемом V принимает вид зависимости между шаровыми частями соответствующих тензоров. Следовательно, построение зависимости $F(P, V, E) = 0$ является основной задачей независимо от применяемой физической и математической модели.

3. Зависимость холодной энергии и холодного давления от удельного объема. Внутренняя энергия E идеального вещества зависит от двух термодинамических функций. Рассмотрим два случая, когда независимыми переменными являются V, S или V, T . Согласно теореме Нернста нулевая изотерма совпадает с нулевой изэнтропой. Следовательно, $E_x(V) = \lim_{S \rightarrow 0} E(V, S) = \lim_{T \rightarrow 0} E(V, T)$. В подавляющем большинстве случаев E представляется в виде суммы холодной и тепловой компонент

$$E = E_x(V) + E_T, \quad (1)$$

где E_T такова, что $\lim_{T \rightarrow 0} E_T(V, T) = \lim_{S \rightarrow 0} E_T(V, S) = 0$.

Основными структурными элементами металлов являются положительные ионы и газ свободных электронов. Силы притяжения определяются кулоновским взаимодействием электронов с ионами, а также обменной энергией между электронами. Силы отталкивания также определяются кулоновским взаимодействием, кинетической энергией свободных электронов и перекрытием электронных оболочек ионов. Анализ [3] указанных сил приводит к следующей зависимости E_x от сжатия $\delta = \rho / \rho_{0k} = V_{0k} / V$.

$$E_x = aF(\delta) - c\delta^{1/3} + d\delta^{2/3}, \quad (2)$$

где $F(\delta) = \exp(b(1 - \delta^{-1/3}))$. Влияние первого члена в этом уравнении в металлах со слабым перекрытием электронных оболочек мало. Если же вклад в энергию взаимодействия перекрытия оболочек не мал, то пренебречь можно третьим членом в (2) и получаемая зависимость

$$E_x = aF(\delta) - c\delta^{1/3} \quad (3)$$

по форме совпадает с уравнением для ионных кристаллов, которое широко применяется для описания [3,4] свойств холодных металлов. Ниже кратко излагаются результаты [3,4] по холодным потенциалам для разных типов веществ. Для валентных кристаллов предлагается уравнение

$$E_x = F(\delta)(a\delta^{1/3} - c), \quad (4)$$

а для некоторых металлов уравнение Борна-Майера

$$E_x = \frac{C_{0k}^2}{b\mu} \left(3\mu (F(\delta) - 1) - b(\delta^\mu - 1) \right) \quad (5)$$

Исходя из феноменологической теории конечных деформаций Муриагана, Бэрр предложил уравнение

$$E_x = \frac{3a_1}{4\rho_{0k}} \left(a_2 + 1,5 - 3(1 + a_2)\delta^{1/2} + (1,5 + 3a_2)\delta^{4/3} - a_2\delta^2 \right). \quad (6)$$

Паком, Эвансом и Паулингом была предложена комбинированная зависимость $E_x(\delta)$, сочетающая экспоненциальную функцию со степенным рядом от $\delta^{1/3}$

$$E_x = \frac{3A}{b\rho_{0k}} \left(\sum_{i=1}^5 \frac{24}{(i-1)!b^{5-i}} \left(\delta^{\frac{1-i}{3}} F(\delta) - 1 \right) + \frac{b}{5} \left(\delta^{-5/3} - 1 \right) \right). \quad (7)$$

Наиболее широкое распространение получило уравнение

$$E_x = A(\delta^{m/3} - 1) - B(\delta^{n/3} - 1). \quad (8)$$

Рассматривая (8) в 1903 г. Ми полагал $n=3$, в 1923 г. Бор использовал (8) также при $n=3$. Целый ряд работ (Борн, Слейтер, Леннард-Джонс, Грюнайзен, Паулинг, Бардин и др.) был направлен на уточнение n и m .

Для описания свойств ряда металлов при $\delta > 1$ в [5] предложена зависимость

$$E_x = C_{0k}^2 \sum_{i=1}^N \frac{3a_i}{i} \left(\delta^{i/3} - 1 \right). \quad (9)$$

Ряд зависимостей E_x от δ обсуждается в [6,7]. Даже из сравнения (2)-(9) видно, что аналитическая форма неустойчива относительно квантовомеханических предположений о свойствах вещества — небольшие отличия в предложениях о квантовомеханических свойствах приводят к сильно различающимся аналитическим зависимостям. Несмотря на заметное продвижение в области теоретических моделей кристаллического состояния вещества, в настоящее время не удается построить теоретическую зависимость $E_x(\delta)$, не требующую использования экспериментальных данных для уточнения численных значений входящих в нее параметров.

Давление P определяется выражением

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S .$$

В классе представлений (1) это уравнение принимает вид

$$P = - \frac{dE_x(V)}{dV} - \left(\frac{\partial E_T}{\partial V} \right)_S .$$

Поскольку при $T=0$, $S=0$, $E_T=0$, то

$$P_x = - \frac{dE_x}{dV} . \quad (10)$$

Таким образом из (1) следует

$$P = P_x(V) + P_T ,$$

где $P_T = - \left(\frac{\partial E_T}{\partial V} \right)_S$. Если от V перейти к безразмерной плотности $\delta = 1/V\rho_{0k}$, то (10) примет вид

$$P_x = \rho_{0k} \delta^2 \frac{dE_x}{d\delta} .$$

Подставляя сюда поочередно $E_x(\delta)$ из (2)–(9), получим уравнения для $P_x(\delta)$

$$P_x = \frac{1}{3} \rho_{0k} \delta^{2/3} \left(abF(\delta) - c\delta^{2/3} + 2d\delta \right) , \quad (11)$$

$$P_x = \frac{1}{3} \rho_{0k} \delta^{2/3} \left(abF(\delta) - c\delta^{2/3} \right) , \quad (12)$$

$$P_x = \frac{1}{3} \rho_{0k} \delta^{2/3} F(\delta) \left(a\delta^{2/3} + ab\delta^{1/3} - bc \right) , \quad (13)$$

$$P_x = \rho_{0k} C_{0k}^2 \delta^{2/3} \left(F(\delta) - \delta^{m+1/3} \right) , \quad (14)$$

$$P_x = \frac{3}{2} a_1 \delta^{5/3} \left(\delta^{2/3} - 1 \right) \left(1 + a_2 - a_2 \delta^{2/3} \right) , \quad (15)$$

$$P_x = A\delta^{-2/3} \left(F(\delta) - 1 \right) , \quad (16)$$

$$P_x = \frac{1}{3} \rho_{0k} \delta \left(Am\delta^{m/3} - Bn\delta^{n/3} \right) , \quad (17)$$

$$P_x = \rho_{0k} C_{0k}^2 \sum_{i=1}^N a_i \delta^{1-i/3} . \quad (18)$$

Любое уравнение состояния применимо в некоторой области изменения δ . Чем шире эта область, тем предпочтительнее оказывается уравнение состояния. Глобальные уравнения состояния, применимые во всей области изменения термодинамических величин, должны удовлетворять условиям

$$P_x = 0, \quad E_x = 0, \quad \frac{dP_x}{d\delta} = \rho_{0k} C_{0k}^2 \quad \text{при } \delta = 1, \quad (19)$$

$$P_x = 0, \quad E_x = Q_0 \quad \text{при } \delta = 0, \quad (20)$$

$$P_x = \infty, \quad E_x = \infty \quad \text{при } \delta = \infty . \quad (21)$$

Величина C_{0k} является предельным значением скорости звука $C(P,T)$ при $P \rightarrow 0$ и $T \rightarrow 0$, метод определения теплоты сублимации Q_0 будет изложен ниже.

Анализ показывает, что из приведенных выше уравнений (2)–(9), (11)–(18) условиям (19), (21) удовлетворяют лишь (2), (8), (9), (11), (17), (18). Остальные уравнения являются локальными, применимыми в ограниченной области изменений $\delta \geq 1$. Условиям (20) удовлетворяют уравнения (5)–(8), (14)–(17). Они могут использоваться в области $\delta < 1$. Полному набору условий (19)–(21) удовлетворяют уравнения (8), (17), которые могут применяться во всем диапазоне $0 \leq \delta < \infty$.

4. Тепловая энергия и тепловое давление. Тепловые составляющие давления и энергии с удовлетворительной точностью могут быть представлены в виде суммы, в которой первое слагаемое описывает свойства атомов (ионов, ядер), а второе – электронов

$$E_T = E_{TЯ}(V, T) + E_{Te}(V, T). \quad (22)$$

Преобразуем уравнение термодинамической совместимости так, чтобы оно не содержало P_x и E_x

$$\left(\frac{\partial E_T}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial P_T}{\partial T}\right)_V - P_T. \quad (23)$$

Подставив (22) в (23), получим линейное дифференциальное уравнение

$$\left(\frac{\partial P_T}{\partial T}\right)_V - \frac{P_T}{T} = \frac{1}{T} \left(\left(\frac{\partial E_{TЯ}}{\partial V}\right)_T + \left(\frac{\partial E_{Te}}{\partial V}\right)_T \right).$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$P_T = \Psi(V)T + T \int \frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial E_{TЯ}}{\partial V} + \frac{\partial E_{Te}}{\partial V} \right) dT. \quad (24)$$

При $T > 300\text{--}400$ К $E_{TЯ}$ и E_{Te} могут быть взяты в виде

$$E_{TЯ} = f(T), \quad E_{Te} = \varphi(V)T^2. \quad (25)$$

Из (24) и (25) следует

$$P_T = \Psi(V)T + \frac{d\varphi}{dV} T^2. \quad (26)$$

Определим еще выражения для C_V , дифференцируя E_T по T

$$C_V = \frac{df(T)}{dT} + 2\varphi(V)T. \quad (27)$$

Величина $df(T)/dT$ есть теплоемкость ядер. В указанном диапазоне температур она с удовлетворительной точностью может быть взята равной $3R$. Тогда

$$f(T) = 3RT.$$

Построенные тепловые компоненты уравнения содержат пока две неопределенные функции $\varphi(V)$ и $\Psi(V)$. Функция $\varphi(V)$ входит во все члены уравнений (22), (26), (27), которые определяют поведение электронов. Функция $\Psi(V)$ входит только в компоненту теплового давления, которая определяет поведение ядер.

Запишем тепловые компоненты уравнения состояния в виде

$$P_T V = \Gamma E_T, \quad (28)$$

где Γ – коэффициент Грюнайзена. Выразим Γ из (28) и подставим в полученное уравнение P_T и E_T . В результате получим

$$\Gamma = \frac{V \left(\Psi(V) + \frac{d\varphi}{dV} T \right)}{3R + \varphi(V)T} \quad (29)$$

При $T \rightarrow 0$ $\Gamma \rightarrow \Gamma_x(V)$ и из (29) следует

$$\Psi(V) = \frac{3R}{V} \Gamma_x(V).$$

При $T \rightarrow \infty$ $\Gamma \rightarrow \Gamma_\infty(V)$ из (29) следует

$$\frac{d \ln \varphi}{d \ln V} = \Gamma_\infty(V).$$

Если предположить, что $\Gamma_x(V) = \Gamma_\infty(V) = \Gamma_0 = \text{const}$, то $\Psi(V)$ и $\varphi(V)$ принимают вид

$$\Psi(V) = \frac{3R}{V} \Gamma_0, \quad \varphi(V) = BV^{G_0},$$

где $B = \text{const}$. Окончательно тепловые компоненты и C_V в уравнении состояния Ми-Грюнайзена (при постоянном Γ_0) примут вид

$$P_T = \frac{\Gamma_0(3RT + BV^{G_0}T^2)}{V},$$

$$E_T = 3RT + BV^{G_0}T^2,$$

$$C_V = 3R + 2BV^{G_0}T.$$

Значение коэффициента Грюнайзена Γ_0 может быть выражено через величины, которые измеряются экспериментально. Продифференцируем (28) по T при постоянном V

$$\Gamma_0 \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_V = V \left(\frac{\partial P_T}{\partial T} \right)_V.$$

Используя термодинамическое уравнение

$$\left(\frac{\partial P_T}{\partial T} \right)_V = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T.$$

и приняв во внимание, что $\left(\frac{\partial P_T}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$, получим

$$\Gamma_0 C_V = -\alpha V^2 \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T. \quad (30)$$

Заменим C_V в (30) теплоемкостью C_P . Для этого используем уравнение

$$\frac{C_P}{C_V} = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V.$$

Производные энтропии по T заменим с помощью уравнений

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_S \left(\frac{\partial P}{\partial S} \right)_T + 1 = 0, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_S \left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_T + 1 = 0$$

производными по V . В результате получим

$$\frac{C_P}{C_V} = \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \left/ \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \right. \quad (31)$$

Выразив из (31) C_V и подставив в (30), получим

$$\Gamma_0 = \frac{\alpha C^2}{C_P} \quad (32)$$

В правой части (32) стоят величины, которые определяются экспериментально: скорость звука, коэффициент объемного расширения и теплоемкость при постоянном давлении. Следует отметить, что при выводе этой формулы предполагалось, что $\Gamma_0 = \text{const}$. Поэтому формула (32) может быть использована лишь в малой окрестности фиксированных P, T, V . Поскольку α, C и C_P измеряются в эксперименте независимо, то, вообще говоря, $\Gamma = \text{const}$. Замена функции $\Gamma(V, T)$ постоянной величиной Γ_0 означает, что уравнение состояния Ми-Грюнайзена применимо лишь там, где мала разность $\Gamma - \Gamma_0$.

Из (29) следует, что при $\Gamma \rightarrow 0$ вклад вторых слагаемых в числителе и знаменателе уменьшается и Γ определяется отношением теплового давления ядер к их тепловой энергии. С целью повышения точности описания свойств веществ многими авторами вводится понятие о решеточном (холодном) коэффициенте Грюнайзена. Для получения зависимости $\Gamma_x(V)$ предполагается, что средняя частота колебаний тела зависит от его объема. Согласно Слэтеру и Ландау все частоты изменяются пропорционально скорости звука и обратно пропорционально межатомному расстоянию. Конкретизация этих предположений может приводить к различным теоретическим зависимостям $\Gamma_x(V)$. В [4] дан их подробный анализ и приведена обобщенная зависимость

$$\Gamma_x(V) = \frac{t-2}{3} - \frac{V}{2} \frac{d^2(P_x V^{2t/3})/dV^2}{d(P_x V^{2t/3})/dV} \quad (33)$$

Значение $t=0$ отвечает теории Ландау-Слэтера, $t=1$ — Дугдейла-Макдональда, $t=2$ — теории свободного объема. Предельное значение $\Gamma_x(V)$ при $V \rightarrow 0$ равно $2/3$.

При высоких температурах основной вклад в тепловое давление и тепловую энергию дают вторые слагаемые в числителе и знаменателе (29), определяемые тепловым возбуждением электронов. В предельном случае очень высоких температур электроны можно считать свободным электронным газом, в котором $\Gamma_0 = 2/3$. В этом случае $\varphi(V)$ может быть записана в виде

$$\varphi(V) = \frac{1}{2} \beta_0 \left(\frac{V}{V_{0\kappa}} \right)^{2/3} \quad (34)$$

Константы интегрирования в (34) взяты так, чтобы $\varphi(V)$ совпала с аналогичной функцией в [5]. Окончательно уравнение состояния принимает вид

$$E_T = E_{TЯ} + E_{Te}, \quad P_T = \Gamma(V, T)(E_{TЯ} + E_{Te})/V, \quad (35)$$

$$E_{TЯ} = 3RT, \quad E_{Te} = 0.5\beta_0 \left(\frac{V}{V_{0\kappa}} \right)^{2/3} T^2, \quad (36)$$

$$C_V = 3R + \beta_0 \left(\frac{V}{V_{0\kappa}} \right)^{2/3} T. \quad (37)$$

$$\Gamma = \frac{3R\Gamma_x(V) + \frac{1}{3}\beta_0\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}T}{3R + 0.5\beta_0\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}T} \quad (38)$$

Построенные изложенным выше способом зависимости P_T , E_T , C_V , Γ от V и T содержат две произвольных постоянных: β_0 в (36) - (38) и t в (33). Этого произвола часто оказывается недостаточно, чтобы описать имеющиеся экспериментальные данные по ударному сжатию и изобарическому тепловому расширению. Поэтому часто вместо $3R$ в (36)-(38) берут C_{V0} , которое может варьироваться вблизи значения $3R$. Кроме того, для увеличения адекватности уравнения состояния свойствам вещества в области средних температур иногда полагают $\Gamma_\infty \neq 2/3$, а, например, [8] $\Gamma_\infty = 0,5$.

Обратим внимание еще на одну особенность рассмотренных выше уравнений состояния. Оно вытекает из предположения, что ядра и электроны находятся в тепловом равновесии и имеют одинаковую температуру. Это значит, что независимость ядерной и электронной компонент в P_T и E_T лишь кажущаяся. На самом деле они связаны друг с другом уравнениями, получающимися после исключения T из $P_{TЯ}$ и P_{Te} , $E_{TЯ}$ и E_{Te} . В случае уравнения состояния (35)-(38) эти уравнения имеют вид

$$E_{Te} = 0.5\beta_0\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}\left(\frac{E_{TЯ}}{3R}\right)^2, \quad (39)$$

$$P_{Te} = 1/3\beta_0V\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}\left(\frac{P_{TЯ}}{3R\Gamma_x(V)}\right)^2. \quad (40)$$

Из (39)-(40) видно, что тепловые электронные компоненты энергии и давления обращаются в ноль одновременно с ядерными компонентами.

В уравнении состояния (35)-(38) можно перейти от независимых термодинамических переменных V , T к независимым переменным V , E . Для этого T выражается с помощью (36) через $E_T = E - E_x$

$$T = \frac{3R}{\beta_0}\left(\frac{V_{0k}}{V}\right)^{2/3}\left(\sqrt{1 + \frac{2\beta_0}{9R^2}\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}E_T} - 1\right). \quad (41)$$

Подставив (41) в (37) и (38), получим выражения для C_V и Γ через V и E_T

$$C_V = 3R\sqrt{1 + \frac{2\beta_0}{9R^2}\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}E_T}, \quad \Gamma = \frac{\Gamma_x(V) + 1/3\left(\sqrt{1 + \frac{2\beta_0}{9R^2}\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}E_T} - 1\right)}{1 + 0.5\left(\sqrt{1 + \frac{2\beta_0}{9R^2}\left(\frac{V}{V_{0k}}\right)^{2/3}E_T} - 1\right)}.$$

В заключение отметим, что изложенные выше уравнения состояния внутренне не противоречивы: поведение P_x , E_x , P_T и E_T согласуется с основной гипотезой о независимости холодных и тепловых членов и не противоречит теореме Нэрнста.

5. Уравнения состояния в переменных V , T . Рассмотрим несколько конк-

ретных уравнений состояния. Рассмотрение начнем с уравнения состояния, предложенного в [8]. Энергия и давление представляется в этом уравнении состояния в виде сумм трех компонент: холодной, тепловой ядерной и тепловой электронной. Для компонент выбраны следующие выражения

$$E_{TЯ} = C_{VЯ}(T - T_0) + E_0 \quad (42)$$

$$P_{TЯ} = \Gamma_x(V)E_{TЯ}/V, \quad P_{Te} = 0,25\beta_0 \left(\frac{V}{V_{0к}} \right)^{0,5} T^2 / V \quad (43)$$

Зависимость $\Gamma_x(V)$ получается из (33) при $t=1$. Как и в рассмотренных в предыдущем параграфе уравнениях состояния, здесь сделано предположение, что температура ядер и электронов одинакова, т.е. они находятся в тепловом равновесии. Это предположение в совокупности с наличием $T_0 \neq 0$ и $E_0 \neq 0$ в (42) приводит к некоторым противоречиям и сужает как область применимости уравнения состояния, так и класс функций, в котором может выбираться зависимость $E_x(V)$. Покажем это на простом примере. Рассмотрим холодную деформацию при $T=0$. В этом случае $E_{Te}=0$,

$$E_{TЯ} = E_0 - C_{VЯ}T_0 = \text{const}, \quad P_{TЯ} = \Gamma_x(V)(E_0 - C_{VЯ}T_0) / V, \quad P_{Te} = 0.$$

Поскольку $E_T \neq 0$, $P_T = F(V)$ при $T=0$, то это уравнение состояния формально не удовлетворяет требованию о разделении холодных и тепловых компонент давления и энергии. Чтобы оно удовлетворяло этому требованию, следует $E_{TЯ}$ и $P_{TЯ}$, получаемые при $T=0$, перенести в "холодные" члены. Новые холодные $P_x(V)$ и $E_x(V)$ примут вид

$$\bar{P}_x = P_x(V) + \Gamma_x(V)(E_0 - C_{VЯ}T_0) / V,$$

$$\bar{E}_x = E_x(V) + (E_0 - C_{VЯ}T_0).$$

$\bar{P}_x(V)$, $\bar{E}_x(V)$ должны удовлетворять уравнению (10). Но так как $E_0 - C_{VЯ}T_0 = \text{const}$, то $\partial \bar{E}_x / \partial V = \partial E_x / \partial V$ и принимает вид

$$\frac{dE_x}{dV} = -P_x(V) - \frac{\Gamma_x(V)}{V}(E_0 - C_{VЯ}T_0) \quad (44)$$

Поскольку $P_x(V)$ и $E_x(V)$ связаны уравнением (10), то (44) справедливо лишь при

$$E_0 - C_{VЯ}T_0 = 0 \quad (45)$$

Верно также и обратное утверждение, что при $E_0 - C_{VЯ}T_0 \neq 0$. $P_x(V)$ и $E_x(V)$ не должны удовлетворять уравнению (10). Поскольку, однако, $P_x(V)$ и $E_x(V)$ в [8] удовлетворяют уравнению (10), а $E_0 - C_{VЯ}T_0 \neq 0$, то остается более внимательно рассмотреть поведение тепловых членов

$$P_T = \frac{\Gamma_x(V) \left(C_{VЯ}(T - T_0) + E_0 \right) + \beta_0 \left(\frac{V}{V_{0к}} \right)^{0,5} T^2}{V} \quad (46)$$

$$E_T = C_{VЯ}(T - T_0) + E_0 + \frac{\beta_0}{2} \left(\frac{V}{V_{0к}} \right)^{0,5} T^2 \quad (47)$$

Подставив (46), (47) в (23) приходим снова к условию (45). Однако, из при-

веденных в [8] данных по E_0 и $C_{VЯ}$ в нормальных условиях следует, что $E_0 - C_{VЯ}T_0 \neq 0$. Это означает, что тепловые члены в уравнении состояния (42)-(43) не удовлетворяют уравнению термодинамической совместимости (23), и рассматриваемое уравнение состояния является термодинамически некорректным.

Аналогично ведут себя тепловые члены в уравнении состояния, предложенном в [5]. Указанная термодинамическая некорректность проявляется в области, где энергия E становится сравнимой с величиной $E_0 - C_{VЯ}T_0$. Так из [8] следует, что для алюминия $E_0 - C_{VЯ}T_0 \approx -0,1$ кДж/г, а минимальная энергия на ударной адиабате в экстремально изученном диапазоне равна $\sim 4,3$ кДж/г. Погрешность в энергии, определяемая термодинамической некорректностью, составила, таким образом, $\sim 2,5\%$, что сравнимо с погрешностью экспериментальных данных. Хорошее совпадение теоретических ударных адиабат с экспериментальными в [5] и [8] объясняется тем, что обе работы посвящены построению уравнений состояния для области высоких и сверхвысоких давлений.

В [9] сделан следующий шаг на пути совершенствования и усложнения уравнения состояния, описанного в предыдущих параграфах. Холодные и тепловые компоненты в энергии и давлении имеют вид

$$P_x = \frac{\rho_0 k C_0^2 k}{\left(\frac{b-1}{3} - \mu\right)} \left(\delta^{2/3} F(\delta) - \delta^{1+m} \right), \quad (48)$$

$$P_{TЯ} = \frac{C_{V0} \Gamma_x(V) T + C_{V\Pi} \Gamma_{\Pi} T^2 f(V)}{(1 + T f(V)) V}, \quad (49)$$

$$P_{Te} = \frac{\Gamma_x V \cdot \beta_0 \beta(V) T_{\Phi} T^2}{2V (V - V_*) (T_{\Phi} + T \beta(V))}, \quad (50)$$

$$E_{Te} = \frac{\beta_0 \beta(V) T_{\Phi} T^2}{2 (T_{\Phi} + T \beta(V))}, \quad (51)$$

$$E_{TЯ} = \frac{C_{V0} T + C_{V\Pi} T^2 f(V)}{1 + T f(V)}. \quad (52)$$

Входящие в уравнения состояния три функции $\beta(V)$, $\Gamma_x(V)$ и $f(V)$ выбираются в виде

$$\beta(V) = \left(\frac{VV_*}{V_{0k}(V + V_*)} \right)^{\Gamma_3}, \quad (53)$$

$$f(V) = f_0 \exp \left[\int \frac{C_{V\Pi} \Gamma_{\Pi} + C_{V0} \Gamma_x(V)}{(C_{V\Pi} - C_{V0}) V} dV \right], \quad (54)$$

$$\Gamma_x(V) = \begin{cases} \Gamma_0 + \frac{t-2}{3} - \frac{V}{2} \frac{d^2 \left(P_x V^{2t/3} \right) / dV^2}{d \left(P_x V^{2t/3} \right) / dV} & \text{при } V < V_{0k} \\ \Gamma_{\Pi} + \sum_{i=1}^4 \eta_i \left(\frac{V_{0k}}{V} \right)^i & \text{при } V \geq V_{0k} \end{cases} \quad (55)$$

Уравнение состояния (48)–(55) термодинамически корректно и с хорошей точностью описывает поведение ряда металлов в области давлений до нескольких десятков мегабар. При этом удовлетворительно описывается поведение металлов не только в области средних и высоких давлений, но и в области низких давлений.

Уравнение состояния (48)–(55) является примером того, как с помощью усложнения произвольных функций, входящих в уравнение состояния, описанное в предыдущих параграфах, расширить область удовлетворительного описания свойств веществ в сторону высоких давлений.

Уравнение состояния (48)–(55) обладает существенным недостатком, который заключается в неверном поведении $E_x(V)$ при $\delta \rightarrow \infty$. При этом $\lim_{\delta \rightarrow \infty} E_x(\delta) = -\infty$. Это ограничивает область применимости уравнения состояния со стороны высоких плотностей.

В работе [10] построено уравнение состояния, предназначенное для описания свойств веществ в области средних и высоких давлений и температур. Кроме уже обсуждавшихся компонент в давлении и энергии включены давление и энергия излучения $P_{\text{и}}, E_{\text{и}}$. Для $P_{\text{ТЯ}}, E_{\text{ТЯ}}, P_{\text{и}}, E_{\text{и}}$ используются широко известные [11] выражения

$$P_{\text{ТЯ}} = RT/V, \quad E_{\text{ТЯ}} = 3/2RT, \quad P_{\text{и}} = 1,37/3T^4, \quad E_{\text{и}} = 1,37VT^4. \quad (56)$$

Константы в (56) взяты так, чтобы величины имели следующие размерности $[E] = \text{МДж/г}$, $[T] = \text{КЭВ}$. Для $P_x(V)$ и $E_x(V)$ предложены зависимости

$$P_x = 3/2\rho\mathcal{E}(\rho)L(x), \quad E_x = \mathcal{E}(\rho)\theta(x),$$

$$\mathcal{E} = 0,15 \left(\frac{Z}{A} \right)^{5/3} \rho^{2/3}, \quad x = 1,578 \left(\frac{ZA}{\rho} \right)^{1/3},$$

$$L = \frac{\sum_{k=0}^7 (k+2)a_k x^k}{\varphi(x)} - d_1 x, \quad \varphi = \sum_{k=0}^7 a_k x^k,$$

$$\theta = 1/\varphi(x) - d_1 x + d_2 x^2$$

Значение a_0 задается равным единице, функции $L(x)$ и $\theta(x)$ при $x=0$ также полагаются равными единице. Давление и энергия электронов определяются уравнениями

$$P_{\text{Te}} = RZ\rho TD(x, t), \quad E_{\text{Te}} = 3/2RZTB(x, t),$$

$$D = 1 + 0,5x \sum_{i=1}^4 \eta_i \frac{d\xi_i}{dx} \Big/ (t + \xi_i(x)),$$

$$B(x, t) = t \sum_{i=1}^4 \eta_i / (t + \xi_i(x)),$$

$$\xi_i = a_{i0} + \frac{a_{i1}}{x} + \frac{a_{i2}}{x^2}, \quad t = 10^{-4} T Z^{-4/3}$$

Коэффициенты, входящие в $\mathcal{E}(x)$, t и x , зависят от атомного номера и атомного веса так, что уравнение состояния удовлетворительно описывает свойства многих материалов в области применимости модели Томас-Ферми и области средних давлений.

В [11] построено уравнение состояния, в котором выделено плавление. В основу построения УРС положено выражение для свободной энергии

$$F(V, T) = F_x(V) + F_a(V, T) + F_e(V, T)$$

Электронная компонента F_e — общая для кристалла и жидкости выбирается в виде

$$F_e = -C_e(V, T) T \ln \left(1 + \frac{B_e(T) T}{3RZ_V} e^{-\gamma_e(V, T)} \right)$$

$$C_e = \frac{3R}{2} \left(Z_V + \frac{\delta_z T_z^2 (1 - Z_V)}{(\delta + \delta_z)(T^2 + T_z^2)} \right) e^{-\frac{T_i}{T}} \exp\left(-\frac{d_i}{d}\right),$$

$$B_e = 2/T^2 \int \left(\int_0^T \beta(\tau) d\tau \right) dT,$$

$$\beta = \beta_i + \left(\beta_0 - \beta_i + \beta_m \frac{T}{T_e} \right) \exp\left(-\frac{T}{T_e}\right),$$

$$\gamma_e = \frac{2}{3} + \left(\gamma_0 - \frac{2}{3} + \gamma_m \frac{T}{T_g} \right) \exp\left(-\frac{T}{T_z} - \frac{(\delta - \delta_e)^2}{\delta \delta_d}\right).$$

В твердом теле зависимость свободной энергии от V и T берется в виде

$$F_a = 3RT \ln \left(\frac{\theta_p(\delta)}{T} \right), \quad \text{где } \delta = \rho / \rho_{0k}.$$

$$\theta_p = \theta_{0p} \delta^{0,5} \left(\frac{d(P_x \delta^{-t})}{d\delta} \right)^{-0,5}$$

В жидкости свободная энергия представляется в виде суммы двух слагаемых

$$F_a = F_t(V, T) + F_m(V, T),$$

где

$$F_t = C_{Vж}(V, T) T \ln \left(\frac{\theta_{ж}(V, T)}{T} \right),$$

$$\theta_{ж} = T \cdot \frac{(T + T_e \theta_{сж})}{T + T_c} \delta^{2/3},$$

$$C_{Vж} = \frac{3R}{2} \left(1 + \frac{T_a \delta}{(\delta + \delta_a)(T + T_a)} \right).$$

Функция $F_m(V, T)$ введена для описания плавления твердого тела и имеет вид

$$F_m = 3R \left(\frac{2\delta^2 T_m}{\delta_m^2 + \delta^2} \left(C_m + \frac{3A_m}{5} \left(\left(\frac{\delta}{\delta_m} \right)^{5/3} - 1 \right) \right) + (B_m - C_m) T \right).$$

Уравнение состояния содержит 40 констант, численные значения которых находятся так, чтобы УРС наилучшим образом описывал ударное сжатие сплошных и пористых образцов, данные по плавлению и асимптотике при $\delta \rightarrow \infty$, $T \rightarrow \infty$, $\delta \rightarrow 0, T \rightarrow 0$.

6. Уравнения состояния в переменных ρ , E . Одно из наиболее простых уравнений состояния [12-15] получается из (8), (17) и (28) при $n/3+1=0$, $m/3+1=\bar{m}$ и $\Gamma=\Gamma_0=\text{const}$. Поскольку $E_T = E - E_x(V)$, то подставив E_T в (28), получим

$$P_T = \Gamma_0 (E - E_x(V)) \llcorner V. \tag{57}$$

Затем подставим (17) и (57) в $P = P_x + P_T$ и получим уравнение

$$P = \Gamma_0 \rho_{0k} \delta E + \rho_{0k} C_{0k}^2 \left(\frac{\bar{m} - 1 - \Gamma_0}{\bar{m}(\bar{m} - 1)} \delta^{\bar{m}} + \frac{\Gamma_0}{\bar{m} - 1} \delta - \frac{\Gamma_0 + 1}{\bar{m}} \right). \tag{58}$$

Численные значения Γ_0 , \bar{m} , C_{0k} подбираются с использованием экспериментальных данных следующим образом. Величина C_0 выражается через скорость звука C_p продольных волн в неограниченной упругой среде и модуль сдвига G по формуле

$$C_0^2 = C_p^2 - \frac{4G}{3\rho_0}.$$

Скорость звука C_{0k} отличается от C_0 по смыслу также, как ρ_{0k} от ρ_0 . Для определения этого отличия необходимо провести экспериментальные измерения ρ_0 , C_p , и G при постоянном давлении в диапазоне $+T < 300^0\text{K}$.

Если пойти по пути упрощений и положить $\Gamma_0 = \bar{m} - 1$, то уравнение (58) существенно упрощается и принимает вид

$$P = (\bar{m} - 1) \rho_{0k} \delta E + \rho_{0k} C_{0k}^2 (\delta - 1).$$

В такой форме уравнение состояния использовалось в [16].

В [17] рассмотрено уравнение состояния, предназначенное для описания свойств материалов в широком диапазоне изменения P и V . При построении зависимости $E_x(V)$ было подмечено, что при $i=3K$, $K=1,2,3...$ в выражении $E_x(\delta)$, предложенном Берчем [3]

$$\dot{E}_x = \sum_{i=0}^N a_i \delta^{2i/3},$$

стоят члены с δ в четных целых степенях. В то же время в диапазоне $1 < \delta \leq 8$ величина $\delta^{2(k+1/3)} + \delta^{2(k+2/3)}$ мало отличается от величины $2,5\delta^{2k+1}$, которая при $K=1,2,3...$ дает члены с δ в нечетных степенях. Это дало повод использовать в качестве зависимости $E_x(\delta)$ уравнение вида

$$E_x = C_{0k}^2 \sum_{\rho=-1}^5 a_{\rho} \delta^{\rho} . \quad (59)$$

Уравнение (59) так же, как и хорошо обоснованное для газов вириальное уравнение состояния [18], есть ряд по степеням сжатия δ . Но эти уравнения состояния имеют разные области применимости. Вириальное уравнение состояния применимо при $\delta < 0,1$, а уравнение состояния Берча при $0,9 < \delta < 1,2$. Исходя из этого, уравнение (59) используется для описания зависимости холодной энергии E_x от сжатия δ на всем промежутке $0 \leq \delta \leq 1$. На промежутке $1 \leq \delta \leq \delta_2$, где $\delta_2 \approx 4-5$, зависимость $E_x(\delta)$ изменяется путем добавления в (59) слагаемого, пропорционального $1/\delta$ и дающего существенный вклад лишь в окрестности $\delta=1$. При увеличении δ вклад этого слагаемого в E_x уменьшается. При $\delta > \delta_2$ все численные значения параметров a_{ρ} изменяются. Таким образом зависимость $E_x(\delta)$ используется в виде кусочно-гладких функций

$$E_{xi} = C_{0k}^2 \sum_{\rho=-1}^5 a_{\rho i} \delta^{\rho} ,$$

где индекс "i" означает номер формулы (набора параметров a_{ei}), применяемой на промежутке $\delta_{i-1} \leq \delta \leq \delta_i$. Холодное давление $P_x(\delta)$ получается после дифференцирования $E_x(\delta)$

$$P_{xi} = \rho_{0k} C_{0k}^2 \sum_{\rho=-1}^5 a_{\rho i} \rho \delta^{\rho+1} . \quad (60)$$

На границах промежутка $0 \leq \delta \leq 1$ параметры $a_{\rho i}$ должны быть такими, чтобы $P_x(\delta)$, $E_x(\delta)$ удовлетворяли условиям (19), (20). Таким образом, на промежутке $0 \leq \delta \leq 1$ остается два параметра, которые можно варьировать для описания экспериментальных и теоретических данных о свойствах вещества.

На третьем промежутке при $\delta > \delta_2$ используются рекомендации из [19] и для $E_x(\delta)$ и $P_x(\delta)$ принимаются зависимости

$$E_x = C_{0k}^2 (a_{31} \delta^{\ell_{31}} - a_{32} \delta^{\ell_{32}} + a_{33}) ,$$

$$P_x = \rho_{0k} C_{0k}^2 (a_{31} \ell_{31} \delta^{\ell_{31}-1} - a_{32} \ell_{32} \delta^{\ell_{32}-1}) \delta .$$

Параметры $a_{31}, a_{32}, a_{33}, \ell_{31}, \ell_{32}$ подбираются так, чтобы наилучшим образом описать зависимость $P_x(\delta)$, полученную в модели Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками [19] с уравнением для ядер [20].

Верхняя граница δ_2 второго промежутка по δ включается в число варьируемых параметров. Уравнения (59), (60) на границах промежутка $1 \leq \delta \leq \delta_2$ должны удовлетворять условиям (19) и условиям непрерывности

$$P_{x1} = P_{x2}, \quad E_{x1} = E_{x2}, \quad \left(\frac{dP_x}{d\delta} \right)_1 = \left(\frac{dP_x}{d\delta} \right)_2 \quad \text{при } \delta = \delta_2 .$$

Таким образом, во втором промежутке по δ остается 4, а на третьем промежутке — 2 варьируемых параметра.

Тепловые составляющие энергии и давления не разделяются на ядерные и электронные. Связь между P_T и E_T берется в виде (28). В нормальных условиях при $T=300\text{К}$, $P=10^{-4}\text{ГПа}$ коэффициент Грюнайзена определяется из уравнения (32) по измеряемым экспериментально α, C , и C_p . Для уравнения

состояния

$$P = P_x(V) + \frac{\Gamma}{V} (E - E_x(V))$$

с помощью уравнения на разрыве

$$E = 0,5P(V_0 - V)$$

исключим зависимость Γ от давления P . В результате получим

$$\Gamma = \frac{V(2E + P_x(V)(V - V_0))}{(V_0 - V)(E - E_x(V))} \quad (61)$$

На ударной адиабате все термодинамические величины выражаются через одну независимую величину. Если в качестве независимой взять V и подставить $E(V)$ в (61), то $\Gamma(V)$ оказывается неоднозначной функцией от V из-за того, что предельное сжатие вещества на ударной волне меньше максимального сжатия. Если же в качестве независимой термодинамической величины выбрать E и подставить $E(V)$ в (61), то $\Gamma(V)$ вдоль ударной адиабаты оказывается функцией однозначной. По этой причине, а также с учетом того, что $\Gamma(E)$ является вдоль ударной адиабаты функцией монотонной, выбирается следующее выражение для $\Gamma(E)$ на промежутке $E_{i-1} \leq E \leq E_i$

$$\Gamma_i = \sum_{k=0}^5 C_{ik} x^k, \quad x = x_{i-1} + d_{i-1} \frac{E - E_{i-1}}{E_i - E_{i-1}} \quad (62)$$

Здесь C_i , d_i — постоянные величины — параметры уравнения состояния на промежутке $E_{i-1} \leq E \leq E_i$, $i=1,2,3,4,5$, а величины E_{i-1} — границы промежутков по энергии E , при переходе через которые параметры C_{i-1} , d_{i-1} изменяются на C_i , d_i . На границах промежутков E_i выполняются условия непрерывности Γ и производной $d\Gamma/dE$ в виде

$$\Gamma_{i-1} = \Gamma_i, \quad \left(\frac{d\Gamma}{dE}\right)_{i-1} = \left(\frac{d\Gamma}{dE}\right)_i \quad \text{при } E = E_{i-1} \quad (63)$$

При $E=0$ вводится требование в виде

$$\Gamma_1 = \Gamma_0, \quad \left(\frac{d\Gamma}{dE}\right)_1 = 0 \quad \text{при } E=0 \quad (64)$$

При $E > E_5$ полагается $\Gamma = \Gamma_\infty = \text{const}$.

В области $\delta < 1$ рассматривается качественно поведение $\Gamma(E)$ вдоль линии $E_x(V)$. При $E=0$, как уже отмечалось, $\Gamma = \Gamma_0$. Затем при уменьшении δ холодная энергия стремится к Q_0 , а Γ изменяется от Γ_0 до значения Γ_Π для пара. Если теперь при $\delta \ll 1$ увеличивать E вдоль изохоры, то при $E > E_5$ должно быть $\Gamma \rightarrow \Gamma_\infty$. Такое поведение $\Gamma(\delta, E)$ в области $0 \leq \delta \leq 1$ качественно описывается зависимостью

$$\Gamma = \Gamma(E) + (\Gamma_*(E) - \Gamma(E))\varphi(\delta),$$

где $\Gamma_*(E)$ определяется на изохоре $\delta = \delta_* \approx 10^{-4} - 10^{-5}$ уравнениями вида (62)-(64) с параметрами C_{ik}^* , d_{ik}^* , E_{ik}^* . Функция $\varphi(\delta)$ берется в виде

$$\varphi(\delta) = \begin{cases} 1 & \text{при } \delta \leq \delta_*, \\ x^2(3-2x) & \text{при } \delta_* \leq \delta \leq 1, \\ 0 & \text{при } \delta \leq \delta \end{cases}$$

Здесь $x = \lg \delta / \lg \delta_*$. Требуется, чтобы $\varphi(\delta)$ удовлетворяла условиям

$$\varphi(\delta) = 0, \quad \frac{d\varphi}{d\delta} = 0 \quad \text{при } \delta = 1,$$

$$\varphi(\delta) = 1, \quad \frac{d\varphi}{d\delta} = 0 \quad \text{при } \delta = \delta_*.$$

В [17] приведены данные сравнения ряда ударных адиабат, полученных по этому уравнению состояния для свинца и алюминия, подтверждающие его удовлетворительную точность в широком диапазоне P и E .

7. Использование ударной адиабаты для построения $P_x(V)$, $E_x(V)$. Для широкого диапазона изменения величин на фронте ударной волны зависимость скорости фронта D от массовой скорости вещества с удовлетворительной точностью описывается линейным соотношением

$$D = C_{0k} + \lambda U, \quad (65)$$

где C_{0k} и λ постоянные величины. Из условий на сильном разрыве

$$P = \rho_{0k} DU, \quad E = 0,5U^2, \quad \rho(D-U) = \rho_{0k} D$$

с помощью (65) исключим D

$$P = \rho_{0k} (C_{0k} + \lambda U) U, \quad E = 0,5U^2, \quad (\rho - \rho_{0k}) (C_{0k} + \lambda U) = \rho U. \quad (66)$$

Перейдем от плотности ρ к относительному изменению удельного объема $\eta = 1 - V/V_{0k} = 1 - \rho_{0k}/\rho$, и введем безразмерные давление $\Pi = P/\rho_{0k} C_{0k}^2$ и энергию $J = E/C_{0k}^2$. Из условий на разрыве (66) выразим Π и J через η

$$\Pi = \frac{\eta}{(1 - \lambda\eta)^2}, \quad J = \frac{\eta^2}{(1 - \lambda\eta)^2}. \quad (67)$$

Уравнение состояния

$$P = \Gamma \rho (E - E_x(\rho)) + P_x(\rho) \quad (68)$$

в безразмерных переменных запишется следующим образом

$$\Pi = \frac{\Gamma}{1 - \eta} (J - J_x(\eta)) + \Pi_x(\eta). \quad (69)$$

Из (10), (67), (69) следует

$$\frac{dJ_x}{d\eta} - \frac{\Gamma}{1 - \eta} J_x = \frac{\eta}{(1 - \lambda\eta)^2} \left(1 - \frac{\Gamma\eta}{2(1 - \eta)} \right), \quad (70)$$

если предположить, что на ударной адиабате Γ зависит только от η , то (70) становится обыкновенным линейным дифференциальным уравнением, решение которого имеет вид

$$J_x = \exp\left(-\int \frac{\Gamma}{1-\eta} d\eta\right) \left(K_1 + \left[\left(1 - \frac{\Gamma\eta}{2(1-\eta)} \right) \frac{\eta}{(1-\lambda\eta)^2} \exp\left(-\int \frac{\Gamma}{1-\eta} d\eta\right) d\eta \right] \right). \quad (71)$$

Предположим, что $\Gamma(\eta)$ вдоль ударной адиабаты линейно зависит от η

$$\Gamma = \Gamma_0 + (\Gamma_\infty - \Gamma_0)\eta. \quad (72)$$

Эта аппроксимация необходима на промежуточном этапе, чтобы из (71) извлечь явную зависимость $J_x(\eta)$. После упрощающего предположения (72) уравнение (71) принимает вид

$$J_x = \frac{1}{(1-\eta)\Gamma_\infty} \exp\left((\Gamma_0 - \Gamma_\infty)\eta\right) (K_1 + F(\eta)),$$

где

$$F(\eta) = \int \left(1 - \frac{\Gamma_0\eta + (\Gamma_\infty - \Gamma_0)\eta^2}{2(1-\eta)} \right) \frac{\eta(1-\eta)}{(1-\lambda\eta)^2} \exp\left((\Gamma_0 - \Gamma_\infty)\eta\right) d\eta.$$

Разлагая подынтегральные функции в ряды Тейлора и интегрируя, получим зависимость $J_x(\eta)$ в виде

$$J_x = \frac{\exp\left((\Gamma_0 - \Gamma_\infty)\eta\right)}{(1-\eta)\Gamma_\infty} \sum_{n=1}^6 \frac{a_n}{n+1} \eta^{n+1}. \quad (73)$$

Из (10) и (73) следует зависимость

$$P_x = \frac{(\Gamma_0 + (\Gamma_\infty - \Gamma_0)\eta) J_x(\eta)}{1-\eta} + \frac{\exp\left((\Gamma_0 - \Gamma_\infty)\eta\right)}{(1-\eta)\Gamma_\infty} \sum_{n=1}^6 a_n \eta^n. \quad (74)$$

Коэффициенты a_n зависят от Γ_0 , Γ_∞ и λ . Таким образом, зная Γ_0 , Γ_∞ и λ , можно определить численные значения a_n для конкретного вещества. Эти значения следует рассматривать, как первое приближение величин a_n . При необходимости уточнения зависимостей $J_x(\eta)$ и $P_x(\eta)$ значения a_n можно варьировать около первого приближения. Для многих веществ первого приближения a_n оказывается достаточно, чтобы с удовлетворительной точностью описать зависимости $J_x(\eta)$ и $P_x(\eta)$. Величина η изменяется от нуля до единицы. Потребовав, чтобы было $dP_x/d\eta = 1$ при $\eta = 0$, найдем значение $a_1 = 1$. Значения остальных значений параметров уравнения состояния (73), (74) для некоторых веществ приведены в табл.1. Область применимости этого уравнения состояния ($\eta \leq 0,6-0,7$) определяется тем, насколько зависимость $D(U)$ отличается от линейной зависимости (65). Вне этой области параметры a_n следует корректировать. Поскольку на ударной адиабате $\eta \geq 0$, то полученное с использованием зависимости $D(U)$ уравнение состояния не применимо при $\eta < 0$.

Если перейти от безразмерной формы (73), (74) к размерной и вместо η вернуться к δ , то зависимости E_x и P_x от δ примут вид

$$E_x = F(\delta) \sum_{n=1}^6 \frac{a_n}{n+1} \left(1 - \frac{1}{\delta} \right)^{n+1}, \quad (75)$$

Т а б л и ц а 1

Веще ст во	Fe	Al	Pb	Cu
ρ_{0k} г/см ³	8,00	2,71	11,34	9,025
C_{0k} км/с	4,10	5,27	1,95	4,100
Γ_0	1,8	2,15	2,74	1,96
Γ_∞	0,667	0,667	0,667	0,667
λ	1,57	1,38	1,61	1,50
a_2	0,440	-0,465	-0,888	0,060
a_3	1,490	0,768	1,384	1,105
a_4	2,109	0,100	-0,078	1,120
a_5	3,507	0,274	0,941	1,772
a_6	5,630	-0,011	0,667	2,477

$$P_x = \left(\Gamma_0 + \Gamma_\infty (\delta - 1) \right) \rho_{0k} E_x + \rho_{0k} F(\delta) \sum_{n=1}^6 a_n \left(1 - \frac{1}{\delta} \right)^n, \quad (76)$$

где

$$F(\delta) = C_{0k}^2 \delta^{\Gamma_\infty} \exp(\Gamma_0 - \Gamma_\infty) \left(1 - \frac{1}{\delta} \right).$$

Уравнения (75), (76) удовлетворяют условиям (19), (21).

8. Определение энергии сублимации холодного вещества. В промежутке $0 \leq \delta \leq 1$ холодное давление $P_x(V)$ должно удовлетворять условию

$$Q_0 = - \int_{V_{0k}}^{\infty} P_x(V) dV,$$

где Q_0 есть работа по разведению атомов холодного кристалла на бесконечное расстояние друг от друга. Рассчитаем эту величину следующим образом. Определим энергию, которую нужно затратить, чтобы нагреть и затем испарить первоначально холодное вещество при постоянном давлении $P = 1,013 \cdot 10^{-4}$ ГПа

$$E_\Gamma = \sum_{i=1}^n \left(\int_{T_{i-1}}^{T_i} C_{P_i}(T) dT + \Delta E_i \right), \quad (77)$$

где T_i — температуры и ΔE_i — теплоты фазовых переходов при постоянном давлении (полиморфных переходов, плавления, испарения). Точка с параметрами E_Γ , T_Γ , V_Γ , $P_\Gamma = 1,013 \cdot 10^{-4}$ ГПа соответствует полному испарению при указанном давлении. Из этой точки далее пар должен расширяться адиабатически до значения $V = \infty$. При таком разлете $P \rightarrow 0$, $T \rightarrow 0$, $V \rightarrow \infty$, $E \rightarrow Q_0$. Будем считать разлетающийся пар идеальным газом с уравнением состояния

$$PV = AT, \quad E = C_V T \quad (78)$$

и постоянной теплоемкостью C_V . Подставляя (78) в уравнение изэнтропы $dE + PdV = 0$ и интегрируя полученное уравнение, получим зависимость T от V в виде

$$T = T_{\Gamma} \left(\frac{V_{\Gamma}}{V} \right)^{\gamma-1},$$

где $\gamma - 1 = A/C_V$. Подставив T в (78), получим выражение для $P(V)$. Подставив его в уравнение энтропии и проинтегрировав полученное уравнение по V от V_{Γ} до ∞ , получим

$$Q_0 = E_{\Gamma} - \frac{A}{\gamma - 1} T_{\Gamma} \quad (79)$$

Для твердого алюминия экспериментальные данные зависимости C_p от T из [21] хорошо описываются интерполяционной зависимостью

$$C_p = \frac{0,814}{100 + 0,6025} \frac{\text{Дж}}{\text{г} \cdot \text{град}}$$

Для жидкого Al $C_p = 1,16$ Дж/г·град. Теплота плавления ΔE_1 и теплота испарения ΔE_2 согласно [21] равны $\Delta E_1 = 0,393$ кДж/г, $\Delta E_2 = 9,21$ кДж/г. Подставив эти данные в (77), получим $E_{\Gamma} = 12,6$ кДж/г. Воспользуемся теперь формулой (79). После подстановки E_{Γ} , $T_{\Gamma} = 2793$ К, $A = 0,308$ Дж/г. град и $\gamma = 5/3$ в (79) определяется численное значение $Q_0 = 11,31$ кДж/г. Аналогичные вычисления для свинца дают $Q_0 = 1,05$ кДж/г.

9. Уравнение состояния жидкости и пара. Есть ряд физических процессов, в которых при повышении температуры твердое тело плавится и затем испаряется. Поэтому любое уравнение состояния, претендующее на описание свойств веществ в широком диапазоне изменения давления и плотности, должно описывать свойства вещества в области смеси жидкости и пара. Здесь будут рассмотрены вопросы построения уравнения состояния в области смеси жидкость-пар в основном так, как они излагаются в [2,22,23].

Пусть в однофазной области известно уравнение состояния

$$P = P(V, E), \quad T = T(V, E) \quad (80)$$

и изотермы в области смеси имеют участок, где $\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T > 0$. Зафиксируем изотерму T_i . Тогда из второго уравнения (80) следует зависимость $E = E(V, T)$. Подставив ее в первое уравнение (80), получим семейство изотерм в переменных P, V

$$P = P(V, E(V, T)) \quad (81)$$

Продифференцируем (81) по V

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_E + \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_V \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T$$

В точках А и В, где $\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = 0$, получаем уравнение

$$F(V, T_i) = \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_E + \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_V \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T = 0$$

Корни этого уравнения V_A и V_B зависят от T_i , и их геометрическое место

точек образует спинопаль. По V_A , V_B и T из (81) определяются P_A и P_B . Равновесное давление P_P двухфазной смеси находится из уравнения Максвелла

$$\Phi(P_P, T_i) = P_P(V_\Gamma - V_{\text{ж}}) - \int_{V_{\text{ж}}}^{V_\Gamma} P(V, E(V, T_i)) dV, \quad (82)$$

где V_Γ и $V_{\text{ж}}$ – корни уравнения

$$P_P - P(V, E(V, T_i)) = 0. \quad (83)$$

Точки P_P , $V_{\text{ж}}$ и P_P , V_Γ образуют бинодаль. Ввиду сложности функции $P(V, E(V, T_i))$ система уравнений (82) и (83) решается численно. Поскольку функция $\Phi(P_P, T_i)$ имеет на концах промежутка $[P_A, P_B]$ разные знаки, то по теореме Больцано – Коши в этом промежутке найдется такое P_P , что при заданном T_i будет $\Phi(P_P, T_i) = 0$, и, следовательно, решение системы уравнений (82) и (83) существует. Из второго уравнения (80) по V_Γ , $V_{\text{ж}}$, T_i находятся значения E_Γ и $E_{\text{ж}}$. Задавая нужный шаг по T , строят с помощью изложенного выше способа табличную зависимость P_i , T_i , $E_{\Gamma i}$, $E_{\text{ж}i}$, $V_{\Gamma i}$, $V_{\text{ж}i}$ вдоль бинодали.

Давление в смеси по заданным значениям V и E рассчитывается следующим образом. Задается первое приближение P . По нему отыскиваются два узла таблицы на бинодали так, чтобы выполнялись неравенства $P_{n-1} \leq P \leq P_n$. Далее интерполяцией находят значения $V_{\text{ж}}$, V_Γ , $E_{\text{ж}}$, E_Γ , соответствующие заданному P . Если P является решением, то функция

$$H(P) = (E - E_{\text{ж}})(V_\Gamma - V_{\text{ж}}) - (E_\Gamma - E_{\text{ж}})(V - V_{\text{ж}})$$

обращается в ноль. В противном случае рассматривается следующее приближение, например, методом Ньютона и т.д.

Анализ изэнтроп в области смеси жидкости и пара, построенных по уравнениям состояния [16, 23] для большого количества веществ, показывает, что они имеют простой вид и могут быть описаны простыми аналитическими зависимостями. Одно из простейших уравнений состояния смеси жидкости и пара имеет вид

$$P = \Gamma_c \rho \left[E - E_n + (E_n - Q_0) \frac{\delta_n - \delta}{\delta_n + K_c \delta} \right],$$

где $\Gamma_c = \text{const}$, δ_n , E_n – безразмерная плотность (сжатие) и внутренняя энергия жидкости в точке кипения при нормальном давлении, K_c – параметр уравнения состояния. При таком описании области двухфазного состояния бинодаль находится, как линия, при переходе через которую сохраняются непрерывными P и E . Эти значения находятся, как решения системы двух нелинейных уравнений

$$V(P - P_x(V)) - \Gamma(E)(E - E_x(V)) = 0,$$

$$PV - \Gamma_c \left[E - E_n + (E_n - Q_0) \frac{\delta_n - \delta}{\delta_n + K_c \delta} \right] = 0.$$

Зависимость $P(V)$ вдоль бинодали табулируется.

10. Уравнение состояния силикатных горных пород. Свойства многих силикатных пород с большими массовыми концентрациями SiO₂ качественно похожи на свойства кварца — одного из основных оксидов, входящих в состав горных пород. Его массовая концентрация в гранитах ≈ 0,75, в диабазах ≈ 0,5, в песчаниках ≈ 0,9. При давлении 10-50 ГПа силикатные породы испытывают полиморфные фазовые переходы из α-кварца в плотные модификации коэзит и стимовит. На ударной адиабате в этом диапазоне давлений отчетливо видны изломы, соответствующие границам области полиморфного фазового перехода. Этот переход происходит неравновесно, и состояния SiO₂ не лежат в области смеси на линии фазового равновесия $F(P,T)=0$. Описание неравновесных фазовых переходов выходит за рамки УРС, которые, как было сказано выше, описывают лишь равновесные состояния и требуют создания математических моделей, включающих кинетические уравнения. Однако, для не очень точных расчетов созданы модели, в которых этот фазовый переход рассматривается как равновесный или квазиравновесный. В таком случае можно обойтись построением соответствующего УРС.

В [13] построено УРС, в котором фазовый переход из α-кварца в стимовит является равновесным. Уравнение состояния плотной и рыхлой фаз берется в виде

$$P_i = \frac{\rho_{0ki} C_{0ki}^2}{n_i} (\delta_i^{n_i} - 1) + \Gamma_i C_{Vi} \rho_i T_i, \quad (84)$$

$$E_i = \frac{C_{0ki}^2}{n_i} \left(\frac{\delta_i^{n_i - 1} - n_i}{n_i - 1} + \frac{1}{\delta_i} \right) + E_{0i} + C_{Vi} T_i, \quad (85)$$

где $C_{Vi} = \text{const}$, $\Gamma_i = \text{const}$, $E_{0i} = \text{const}$, $i = 1, 2$ — номер фазы. Область равновесной смеси определяется уравнениями

$$P_1 = P_2 = P, \quad T_1 = T_2 = T, \quad (86)$$

$$E_1 + PV_1 - TS_1 = E_2 + PV_2 - TS_2. \quad (87)$$

Энтропия S_i выражается из (84), (85) и имеет вид

$$S_i = C_{Vi} \ln(TV_i^{\Gamma_i}) + S_{0i}. \quad (88)$$

Значения E_1 и E_2 из (85) и S_1 , S_2 из (88) подставим в (87). В результате получим уравнение

$$\begin{aligned} & \frac{C_{0k1}^2}{n_1} \left(\frac{\delta_1^{n_1 - 1} - n_1}{n_1 - 1} + \frac{1}{\delta_1} \right) - \frac{C_{0k2}^2}{n_2} \left(\frac{\delta_2^{n_2 - 1} - n_2}{n_2 - 1} + \frac{1}{\delta_2} \right) + T \left(C_{V1} \left(1 - \ln(TV_1^{\Gamma_1}) \right) - \right. \\ & \left. - C_{V2} \left(1 - \ln(TV_2^{\Gamma_2}) \right) \right) + P(V_1 - V_2) + E_{01} - E_{02} + T(S_{01} - S_{02}) = 0. \end{aligned} \quad (89)$$

Исключив в (89) ρ_1 и ρ_2 с помощью (84), получим уравнение линии фазового равновесия

$$P = F(T) \quad \text{или} \quad T = T(P). \quad (90)$$

Границы фаз

$$\delta_{ri} = f_i(P), \quad E_{ri} = \varphi_i(P) . \quad (91)$$

находя из (84), (85) и (90). В области смеси P находится по $\rho_1 E$ из (91) и уравнения

$$\frac{E - E_{r1}(P)}{E_{r2}(P) - E_{r1}(P)} = \frac{V - V_{r1}(P)}{V_{r2}(P) - V_{r1}(P)}, \quad (92)$$

которое решается численно. При использовании этого УРС в расчетах возникают ударные волны разрешения и происходит расщепление ударной волны сжатия, что надежно не подтверждается экспериментально. Кроме того, равновесность фазового перехода не допускает существования стишовита при нормальных условиях, что тоже противоречит опытным данным.

В [24] предложено уравнение состояния кварца, в котором фазовый переход при нагрузке происходит равновесно, а при разгрузке не происходит совсем. УРС рыхлой фазы имеет вид

$$P = \Gamma_i \rho (E - E_{Hi}(V)) + P_{Hi}(V), \quad (93)$$

$$P_{H1} = 1/n (\delta^n - 1) . \quad (94)$$

В уравнении состояния стишовита зависимость давления P_H от плотности на ударной адиабате имеет вид, отличный от (94)

$$P_{H2} = \left(\frac{C_{0k2}}{C_{0k1}} \right)^2 \frac{1}{(1 - \lambda((\delta - 1)/\delta))^2} . \quad (95)$$

Зависимость $\Gamma(\delta)$ имеет вид

$$\Gamma = \Gamma_\infty + (\Gamma_0 - \Gamma_\infty) \left(\frac{\delta_{0k2}}{\delta} \right)^2 . \quad (96)$$

При разгрузке из области смеси предполагается, что массовые концентрации плотной и рыхлой фаз остаются постоянными вдоль адиабат. В этом случае P находится из уравнения (92).

Следует обратить внимание на то, что при разгрузке сохраняется массовая концентрация, что является описанием процесса, т.к. ξ изменяется при переходе от одной частицы к другой

$$\xi = \frac{V - V_{c\Gamma}(P)}{V_{kb}(P) - V_{c\Gamma}(P)} = \text{const} .$$

Это противоречит утверждению, что УРС описывает только равновесные состояния вещества. Поэтому в [24] предложен не УРС, а способ описания поведения кварца в области фазового перехода.

11. Уравнение состояния продуктов детонации. Для описания поведения *продуктов детонации* (ПД) широко используются простейшие УРС [25, 26] вида

$$P = A\rho^n , \quad (97)$$

$$P = (\gamma - 1)\rho E + A\rho^n . \quad (98)$$

Однако точность этих УРС невысока. Поэтому в течение многих лет предпринимаются попытки построения более сложных и более точных УРС ПД. В [27] предложено уравнение состояния гексогена, в [28] уравнение состояния ПД целой группы плотных *взрывчатых веществ* (ВВ).

Рассмотрим УРС ПД из [29], в котором для определения численных значений параметров используются зависимости от начальной плотности ВВ, скорости нормальной детонации $D(\rho_0)$, массовой скорости на фронте детонационной волны $U(\rho_0)$ и калоритности $Q(\rho_0)$.

Зависимость P от ρ , E берется в виде

$$P = (\gamma(\rho) - 1)\rho E + \varphi(\rho) . \quad (99)$$

Для нахождения функций $\gamma(\rho)$ и $\varphi(\rho)$ строится уравнение линии точек Жуге, соответствующих различным значениям ρ_0 . Эта линия определяется уравнением (99) и уравнениями на сильном разрыве. Проводится анализ зависимостей $D(\rho_0)$, $U(\rho_0)$, $Q(\rho_0)$, строятся численные зависимости $\gamma(\rho_0)$ и $\varphi(\rho_0)$ и затем делается переход от ρ_0 к ρ . В результате получаются выражения

$$\gamma = \begin{cases} \gamma_0 + (\gamma_\infty - \gamma_0)x(3 - 3x + x^2) & \text{при } x \leq 1 , \\ \gamma_\infty & \text{при } x > 1 , \end{cases}$$

где $x = \delta/\delta_*$,

$$\Phi = \begin{cases} \rho_{0k} D_k^2 A (x-1)^m & \text{при } x > 1 , \\ 0 & \text{при } x \leq 1 . \end{cases}$$

Численные значения A , m , δ_* выбираются так, чтобы наилучшим образом описывались экспериментальные зависимости: $D(\rho_0)$, $U(\rho_0)$, $Q(\rho_0)$. Для широкого круга ВВ значения A , m , δ_* таковы $m=2,284$, $A=0,0139$, $\gamma_0=1,375$, $\gamma_\infty=1,67$, $\delta_*=0,36$.

В [29] предлагаются конкретные значения ρ_{0k} , D_k для нескольких ПД.

Заключение. Излагаются различные подходы к построению УРС. Все подходы делаются для достижения трех основных целей:

- точности УРС,
- экономичности УРС,
- максимального диапазона применимости УРС.

Работы по созданию УРС, близких к указанным целям, ведутся успешно в нескольких организациях. Разработана система математического описания свойств веществ и созданы базы термодинамических свойств. Они используются многими прикладными программами с разными математическими моделями для проведения массовых расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Куропатенко В.Ф., Коваленко Г.В., Кузнецова В.И., Михайлова Г.И., Сапожникова Г.Н. Комплекс программ ВОЛНА и неоднородный разностный метод для расчета неустановившихся движений сжимаемых сплошных сред // Вопросы атомной науки и техники Сер.: Матем. моделирование физических процессов, 1989, Вып.2, С.9-25.
2. Куропатенко В.Ф. Математическое моделирование неустановившихся движений сред с равновесными

- фазовыми переходами // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Методики и программы расчета задач матем. физики, 1979, Вып.4(6), С.3.
3. *Жарков В.Н., Калинин В.А.* Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968, С.311.
 4. *Альтшулер Л.В.* Применение ударных волн в физике высоких давлений // Успехи физических наук, 1965, Т.85, Вып.2, С.197-257.
 5. *Кормер С.Б., Урлин В.Д.* Об интерполяционных уравнениях состояния металлов для области сверхвысоких давлений // Докл. АН СССР, 1960, Т.131, №3, С.542-545.
 6. *Зейтц Ф.* Современная теория твердого тела. М.: Изд-во иностр. лит. 1949, С.280.
 7. *Паулинг Л.* Природа химической связи. М.: Изд-во иностр. лит. 1947.
 8. *Альтшулер Л.В., Кормер С.Б., Баканова А.А., Трунин Р.Ф.* Уравнения состояния алюминия, меди и свинца для области высоких давлений // ЖЭТФ, 1960, Т.38, Вып.3, С.790-798.
 9. *Сапожников А.Т., Першина А.В.* Полуэмпирическое уравнение состояния металлов в широком диапазоне плотностей и температур // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Методики и программы численного решения задач матем. физики, 1979, Вып. 4(6), С.47-56.
 10. *Елисеев Г.М., Клишишов Г.Е.* Уравнение состояния твердых веществ и его сплайн-аппроксимация. Препр. / Инст. Прикл. Матем., М., 1982, №173.
 11. *Бумжан А.В., Ломоносов И.В., Фортвов В.Е.* Модели широкодиапазонных уравнений состояния веществ при высоких плотностях веществ. Препр. Инст. высоких температур АН СССР. М., 1990, С.44.
 12. *Зельдович Я.В., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматгиз, 1963, С.686.
 13. *Крупников К.К., Куропатенко В.Ф., Сапожников А.Т., Симаков Б.Н., Симоненко В.А.* Расчет взрывов в средах с полиморфными фазовыми переходами // Докл. АН СССР, 1972, Т.202, №2, С.300-301.
 14. *Куропатенко В.Ф., Сапожников А.Т.* Расчет неустановившихся движений сжимаемых сред с фазовыми переходами // Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1971, Т.2, №5, С.93-97.
 15. *Быченко В.А., Гаджиева В.В., Куропатенко В.Ф.* Влияние положения и величины щели на количество горной породы, раздробленной при взрыве // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых, 1973, №2, С.53-57.
 16. *Куропатенко В.Ф.* Дробление вещества при симметричном столкновении двух пластин // Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск. 1970, Т.1, №5, С.67-75.
 17. *Куропатенко В.Ф., Минаева И.С.* Уравнение состояния некоторых металлов. // Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1982, Т.13, №6, С.69-74.
 18. *Мейсон Е.А., Сперлинг Т.Х.* Виральное уравнение состояния. М.: Мир, 1972.
 19. *Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В.* Таблицы термодинамических функций веществ при высокой концентрации энергии. Препр. / Инст. Прикл. Матем. М., 1975, №35, С.31.
 20. *Копышев В.Л.* О термодинамике ядер одноатомного вещества // Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1977, Т.8, №6, С.54-56.
 21. *Чиркин В.С.* Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат, 1968, С.484.
 22. *Бакулин Ю.Д., Куропатенко В.Ф., Лучинский А.В.* Магнитогидродинамический расчет взрывающихся проводников // ЖЭТФ, 1976, Т.46, №9, С.1963-1971.
 23. *Куропатенко В.Ф., Минаева И.С.* Математическое моделирование поведения металлов в широком диапазоне изменения давления // Физическая механика неоднородных сред. Новосибирск, 1984.
 24. *Замышляев Б.В., Евтерев Л.С., Кривошеев С.Г.* Об уравнении состояния горных пород при взрывных нагрузках // Докл. АН СССР, 1980, Т.251, №2, С.322-326.
 25. *Баум Ф.А., Стажкокевич К.П., Шехтер Б.И.* Физика взрыва. М.: Физматгиз, 1959, С.800.
 26. *Юхансон К., Персон П.* Детонация взрывчатых веществ. М.: Мир, 1973.
 27. *Кузнецов Н.М., Шведов К.К.* Уравнение состояния продуктов детонации гекогена // ФГВ, 1965, №4, С.85-92.
 28. *Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Телегин Г.С.* Изэнтропы расширения продуктов взрыва конденсированных ВВ // ПМТФ, 1969, №4, С.129-135.
 29. *Куропатенко В.Ф.* Уравнение состояния продуктов детонации конденсированных ВВ // Численные методы механики сплошных сред. Новосибирск, 1977, Т.8, №6, С.68-71.