

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ТЕПЛОФИЗИКЕ
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ФИЗИКЕ ПЛАЗМЫ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИКА ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ
ВЕЩЕСТВА — 2008

Черноголовка — 2008

ветствующей полной ионизации атомов углерода.

Полученные расчётные результаты практически не изменяются при изменении электронного коэффициента Грюнайтзена от $\gamma_e = \frac{1}{2}$ до $\gamma_e = \frac{2}{3}$. Результаты также не изменяются в случае пренебрежении температурной зависимостью $a = a(T)$ в (4). То есть в связи с малостью величины q_0 в рассматриваемом диапазоне температур и давлений в формуле (4) и соответственно в (3) можно принять $a = a_0 = const$.

Таким образом, в работе дана оценка коэффициента электронной теплоёмкости $\beta_0 = 5.5 \pm 1.5$ мДж/(моль·К²) для полумпирического описания теплофизических свойств проводящего алмазного расплава при давлении ≈ 1350 ГПа и температуре ≈ 11500 К.

Работа выполнена при частичной поддержке программы Президиума РАН «Физика и механика сильно сжатого вещества и проблемы внутреннего строения Земли и планет».

1. Grumbach M. P., Martin R., // Phys. Rev. B. 1996, V.54 P. 15730–15741.
2. Молодец А. М., и др. // Физика горения и взрыва.

- 1999, T.35, No2, C. 81–87.
3. Brygoo S. et al. // Nature Materials. 2007. V.6. P. 274–277.
4. Bradley D. K. et al. // Physical Review Letters. 2004. V. 93, No19. P. 2195506.
5. Correa A. A., Bonev S. A., Galli G. A., Carbon under extreme conditions: boundaries and electronic properties from first-principles theory // PNAS. January 31, 2006. V. 103, № 5. P. 1204–1208.
6. Correa A. A., Schwegler E., Benedict L., Galli G., Gygi F. Toward a multiphase equation of state for Carbon from first principles // www.sandia.gov/ASC/pubs-pres/PIMeeting/2007/schwegler/Carbon-ASC1.pdf
7. Альтшулер Л. В., Применение ударных волн в физике высоких давлений // Успехи физических наук. 1965, Т. 85, Вып. 2. С. 197–258.
8. Бушман А. В., Ломоносов И. В., Фортков В. Е. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черноголовка: препринт, 1992.
9. Павловский М. Н. Ударное сжатие алмаза // Физика твёрдого тела. 1971. Т. 13, Вып. 3. С. 893–895.
10. Celliers P., Dynamic compression of diamond across the melt transition // Bulletin of the American Physical Society, 2007, V. 52. № 8, P. 15, APS.

МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ МОДЕЛИ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СРЕДЫ

Куропатенко В. Ф.

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск

v.f.kuropatenko@vniitf.ru

Введение. В [1] изложена модель многокомпонентной среды (МКС), принципиально отличающаяся от существующих ранее моделей [2], [3] наличием кластерной формы взаимодействия i -го компонента со смесью в целом [4]. Эта форма взаимодействия введена не вместо, а в дополнение к ранее обоснованной [2], [5] форме парных взаимодействий компонентов. Она выражается в виде сил и потоков энергии, в результате чего система законов сохранения i -го компонента имеет вид

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \nabla \alpha_i \rho_i \bar{U}_i = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i \bar{U}_i}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i U_{ki} + \alpha_i \bar{F}_{ki}) + \nabla \alpha_i P_i - \alpha_i \bar{R}_i = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i \varepsilon_i}{\partial t} + \nabla (\alpha_i \bar{U}_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i) + \alpha_i \bar{Q}_i) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \bar{F}_{ki} \bar{U}_i) - \alpha_i A_i - \alpha_i \Phi_i = 0, \quad (3)$$

где A_i — работа вектора \bar{R}_i , $\rho_i, P_i, E_i, \bar{U}_i$ — физические характеристики i -го компонента (плотность, давление, удельная внутренняя энергия

и скорость), α_i — объемная концентрация, $k = x, y, z$. Выражения для сил \bar{F}_{ki} и потоков энергии \bar{Q}_i , определяются из следующих требований:

– После суммирования по i законов сохранения компонентов по отдельности должны получаться законы сохранения смеси

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \bar{U} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{U}}{\partial t} + \nabla P + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \bar{U} U_k + \bar{F}_k) = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla (\bar{U} (P + \rho \varepsilon) + \bar{Q}) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{F}_k \bar{U}) = 0. \quad (6)$$

– Законы сохранения компонентов (1)–(3) и смеси (4)–(6) должны быть инвариантны к преобразованию Галилея.

В результате \bar{F}_{ki} и \bar{Q}_i имеют вид

$$\bar{F}_{ki} = -0.5 \rho_i (U_{ki} - U_k) (\bar{U}_i - \bar{U}), \quad (7)$$

$$\bar{Q}_i = 0.5 (\bar{U} - \bar{U}_i) (P_i + \rho_i E_i). \quad (8)$$

Силы и потоки энергии (7), (8) универсальны. Они не зависят от индивидуальных свойств компонентов таких, как скорость звука, вязкость, гетерогенность, размеры частиц, шероховатость поверхности частиц и т.д. и не содержат эмпирических констант. Все эти различия компонентов учитываются [2], [5] величинами \bar{R}_i, Φ_i , описывающими парные взаимодействия компонентов.

Приведенное в [1], [4] обоснование \bar{F}_{ki}, \bar{Q}_i опирается на физику макроуровня, т.к. следует из уравнений, справедливых для сплошной среды.

Физические характеристики сплошной среды получаются при переходе с микроуровня на макроуровень как результат соответствующих усреднений. Покажем, что для простейшей модели смеси одноатомных идеальных газов при переходе с микроуровня на макроуровень получается выражение для силы \bar{F}_{ki} .

Идеальный газ. Идеальный газ — это математическая абстракция, основанная на хорошо известных упрощающих гипотезах [6], [7]. Пусть в замкнутом объеме $d\theta$ находится n невзаимодействующих молекул, движущихся со скоростями \bar{U}_ν . В любой момент времени газ имеет массу dM , количество движения $d\bar{K}$ и энергию dQ , которые определяются уравнениями

$$dM = \sum_{\nu=1}^n m_\nu, \quad d\bar{K} = \sum_{\nu=1}^n m_\nu \bar{U}_\nu, \quad (9)$$

$$dQ = \sum_{\nu=1}^n 0.5 m_\nu \bar{U}_\nu^2, \quad (10)$$

где m_ν — масса ν -й молекулы. Уравнения (9) позволяют определить плотность ρ и скорость \bar{U} сплошной среды

$$\rho = \frac{dM}{d\theta}, \quad \bar{U} = \frac{d\bar{K}}{dM} = \sum_{\nu=1}^n \eta_\nu \bar{U}_\nu, \quad (11)$$

где $\eta_\nu = m_\nu/dM$ — массовая концентрация ν -й молекулы. Барицентрическая [2] скорость \bar{U} , являющаяся скоростью массы dM , определяет кинетическую энергию сплошной среды

$$dQ_1 = 0.5 \bar{U}^2 dM. \quad (12)$$

Из (10)–(12) следует

$$dQ = dQ_1 + 0.5 \sum_{\nu=1}^n m_\nu (\bar{U}_\nu - \bar{U})^2. \quad (13)$$

При переходе на макроуровень второе слагаемое в (13) превращается во внутреннюю энергию. Разделив (13) на dM , получим

$$\varepsilon = E + 0.5 \bar{U}^2, \quad (14)$$

где ε — удельная полная энергия, $0.5 \bar{U}^2$ — удельная кинетическая энергия, E — удельная внутренняя энергия

$$E = \sum_{\nu=1}^n 0.5 \eta_\nu (\bar{U}_\nu - \bar{U})^2. \quad (15)$$

Будем считать объем $d\theta$ кубом с длиной ребра $d\theta^{1/3}$ и площадью грани $S_x = S_y = S_z = d\theta^{2/3}$. Поскольку масса dM движется со скоростью \bar{U} , то и стенка объема $d\theta$ движется со скоростью \bar{U} . Рассмотрим движение ν -й молекулы в направлении грани S_x , ортогональной оси Ox . При $U_{x\nu} - U_x > 0$ молекула ударяется о грань S_x и отражается от нее. Обозначим скорость ν -й молекулы после соударения через \bar{U}_ν^f . Тогда количество ее движения изменится на величину

$$\Delta \bar{K}_\nu = m_\nu (\bar{U}_\nu^f - \bar{U}_\nu).$$

Будем считать взаимодействие абсолютно упругим

$$U_{x\nu}^f - U_x = -(U_{x\nu} - U_x), \quad (16)$$

$$U_{y\nu}^f = U_{y\nu}, \quad U_{z\nu}^f = U_{z\nu}. \quad (17)$$

Отразившись, молекула летит в обратном направлении, отражается от противоположной грани и через время

$$\Delta t_\nu = \frac{2d\theta^{1/3}}{(U_{x\nu} - U_x)}$$

вновь ударяет по грани S_x . Введем силу $\bar{\varphi}_{x\nu}$, импульс которой $\bar{\varphi}_{x\nu} \Delta t_\nu$ равен $\Delta \bar{K}_\nu$. Из закона сохранения количества движения и условия (16) после суммирования по всем молекулам получим выражение силы, действующей на газ со стороны единичной площадки грани S_x

$$\bar{\varphi}_x = 0.5 \rho \sum_{\nu=1}^n \eta_\nu (\bar{U}_\nu^f - \bar{U}_\nu) (U_{x\nu} - U_x). \quad (18)$$

Аналогичные выражения получим для сил, действующих на единичных площадках граней S_y, S_z .

Вектора $\bar{\varphi}_k$, ($k = x, y, z$) образованы элементами строк тензора $\bar{\varphi}$, являющегося силой, действующей на газ со стороны стенки. Согласно третьему закону Ньютона, силы, действующие со стороны газа на стенку, имеют знак, противоположный знаку $\bar{\varphi}_k$. Согласно правилам механики [8], давление равно сумме диагональных членов с обратным знаком деленной на три

$$P = \frac{1}{3} \rho \sum_{\nu=1}^n \eta_\nu (\bar{U}_\nu - \bar{U})^2. \quad (19)$$

С помощью (15) это уравнение принимает классическую форму, не содержащую величин микроуровня

$$P = \frac{2}{3} \rho E. \quad (20)$$

Т.о., переход с микроуровня на макроуровень завершен. Уравнения (14) и (20) не содержат информации о микроуровне. При переходе на макроуровень были выполнены все законы сохранения. Обращаем внимание, что для получения уравнения состояния не потребовалось переходить в систему координат, в которой объем $d\theta$ покоится.

Идеальный газ в смеси. Мезоуровень. Определим силы, действующие на газ, являющийся компонентом смеси. Пусть в объеме $d\theta$ находится N идеальных газов. Каждый газ с номером i содержит n_i молекул и обладает массой dM_i , количеством движения $d\bar{K}_i$ и энергией dQ_i

$$dM_i = \sum_{\nu=1}^{n_i} m_{\nu i}, \quad d\bar{K}_i = \sum_{\nu=1}^{n_i} m_{\nu i} \bar{U}_{\nu i},$$

$$dQ_i = \sum_{\nu=1}^{n_i} 0.5 m_{\nu i} \bar{U}_{\nu i}^2. \quad (21)$$

Разделим объем $d\theta$ между всеми молекулами. Объем, занимаемый i -м компонентом смеси, обозначим $d\theta_i$. Отношение

$$\alpha_i = \frac{d\theta_i}{d\theta}$$

называется [2] объемной концентрацией i -го компонента. Его физическая и парциальная плотности определяются уравнениями

$$\rho_i = \frac{dM_i}{d\theta_i}, \quad \alpha_i \rho_i = \frac{dM_i}{d\theta}. \quad (22)$$

Введение парциальной плотности $\alpha_i \rho_i$ означает, что газ с номером i заполняет весь объем $d\theta$ так, как будто других газов нет. С учетом этого, следуя правилам, изложенным в п.1, получим выражение для характеристик i -го газа

$$\bar{U}_i = \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} \bar{U}_{\nu i}, \quad \eta_{\nu i} = \frac{m_{\nu i}}{dM_i}, \quad (23)$$

$$E_i = 0.5 \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} (\bar{U}_{\nu i} - \bar{U}_i)^2. \quad (24)$$

Определение сил, действующих на i -й газ, разделим на два этапа. На первом этапе рассмотрим взаимодействие νi -й молекулы с гранью S_x , движущейся со скоростью i -го газа \bar{U}_i , т.е. без учета

влияния смеси. На втором этапе рассмотрим взаимодействие i -го газа с гранью S_x , движущейся со скоростью смеси \bar{U}

$$\bar{U} = \sum_{i=1}^N \eta_i \bar{U}_i, \quad dM = \sum_{i=1}^N dM_i, \quad \eta_i = \frac{dM_i}{dM}. \quad (25)$$

Проделав те же рассуждения, что и для одного газа в объеме $d\theta$, получим выражение для силы, действующей со стороны газа на единичную площадку поверхности объема $d\theta$

$$P_i = \frac{1}{3} \alpha_i \rho_i \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} (\bar{U}_{\nu i} - \bar{U}_i)^2. \quad (26)$$

Из (24) и (26) следует

$$P_i = \alpha_i \left(\frac{2}{3} \rho_i E_i \right). \quad (27)$$

Уравнение состояния i -го газа не должно зависеть от того, является газ уединенным или находится в составе смеси (т.е. от индекса i) и его физические величины P_i, ρ_i, E_i должны быть связаны уравнением состояния

$$P_i = \frac{2}{3} \rho_i E_i. \quad (28)$$

Из (27) и (28) следует, что сила P_i является парциальным давлением i -го газа ($P_i = \alpha_i P_i$).

Газ с номером i является одним из N компонентов смеси, масса и средняя скорость которой (25) определяются законами сохранения.

Будем теперь считать каждый компонент i -й частицей и рассмотрим её столкновение с гранью S_x объема $d\theta$. Движение компонентов смеси с разными скоростями приводит к релаксационным процессам и порождает диссипацию энергии, которая определяется неупругим характером взаимодействия. Пусть скорость i -й частицы после удара равна \bar{U}_i^f . Тогда ее количество движения при ударе изменится на величину

$$\Delta \bar{K}_i = (\bar{U}_i^f - \bar{U}_i) dM_i.$$

Время, необходимое i -й частице для преодоления расстояния $2d\theta^{1/3}$, равно

$$\Delta t_{xi} = \frac{d\theta^{1/3} (\bar{U}_{xi}^f - \bar{U}_{xi})}{(\bar{U}_{xi} - \bar{U}_x) (\bar{U}_{xi}^f - \bar{U}_x)}$$

В случае закона взаимодействия

$$\bar{U}_{ki}^f - \bar{U}_k = -0.5 (\bar{U}_{ki} - \bar{U}_k) \quad (29)$$

парциальная сила $\alpha_i \bar{F}_{xi}$, действующая со стороны единичной площадки грани S_x и приводящая к изменению количества движения i -й частицы на величину $\Delta \bar{K}_i$, имеет вид

$$\alpha_i \bar{F}_{xi} = -\frac{1}{2} \alpha_i \rho_i (\bar{U}_i - \bar{U}) (\bar{U}_{xi} - \bar{U}_x). \quad (30)$$

Поскольку направления Ox, Oy, Oz равноправны, то после сокращения на α_i силы действующие на i -й компонент со стороны смеси имеют вид (7) при $k = x, y, z$.

После суммирования сил \vec{F}_{ki} по всем компонентам определится сила, действующая на стенки объема $d\theta$. Она должна иметь противоположный знак

$$\vec{F}_k = - \sum_{i=1}^N \alpha_i \vec{F}_{ki}.$$

Закон взаимодействия (29) приводит к диссипации энергии. Удельная кинетическая энергия i -го компонента при этом изменяется на величину

$$\Delta\theta_i = \frac{3}{8}(3\bar{U}^2 - 2\bar{U}_i\bar{U} - \bar{U}_i^2).$$

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СМЕСИ

Бельзеева Р.К.

*НГУ, Новосибирск
rutia@post.nsu.ru*

Введение. В случае, когда смесь находится в термодинамическом равновесии, ее движение можно описать как движение одного континуума с особым уравнением состояния, учитывающим свойства компонентов смеси и их концентрации, что приводит к значительному сокращению числа уравнений.

В рамках такого способа описания смеси, рассмотренного в работах [1–3] и др., принято, что уравнения состояния компонентов в среде такие же, как в свободном состоянии. В [1] подобное уравнение получено для трехкомпонентной смеси при условии, что объемные содержания компонентов постоянны. В [2] найдена зависимость среднего давления твердой фазы как функция пористости и внутрипорового давления при статическом нагружении твердой пористой смеси. В [3] приведено уравнение состояния равновесной смеси калорически совершенного газа и несжимаемого твердого вещества. В [4] предложено уравнение состояния пористой смеси конденсированных компонентов в форме Ми-Грюнайзена.

Используемые уравнения состояния. Равновесной считается система для которой выполняются условия: $P_i = P, T_i = T, u_i = u$, где P_i — давление, T_i — температура, u_i — массовая скорость компонента i ; P, T, u — давление, температура и массовая скорость смеси соответственно. В данной работе уравнение состояния смеси и уравнения состояния всех компонентов используются в одной и той же форме Ми-Грюнайзена. Применимость уравнения состояния в подобной форме для воздуха показана в [4].

Давление вещества в области взрывных нагрузок обычно представляют в виде суммы двух составляющих $P = P_X + P_T$, где $P_X =$

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты № 07-01-96011 и № 07-01-00378.

1. Куропатенко В. Ф. Модель многокомпонентной среды // ДАН. 2005. Т. 403, № 6. С. 761–763.
2. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
3. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
4. Куропатенко В. Ф. // ПМТФ. 2005. Т. 46. С. 7–15.
5. Струминский В. В. // Молекулярная газодинамика и механика неоднородных сред. Сб. трудов отд. механики АН СССР. М.: Наука. 1990. С. 263.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц И. М. Статическая физика. М.: Наука, 1964.
7. Френкель Я. И. Статическая физика. М., Л.: Изд. АН СССР, 1948.
8. Куропатенко В. Ф. Модели механики сплошных сред. Челябинск, Челяб. гос. университет. 2007.

$A[(\rho/\rho_{i0})^{n_i} - 1]$ — это упругое давление, а $P_T = \gamma\rho E_T$, — тепловое. Здесь γ — коэффициент Грюнайзена, ρ — плотность вещества, E_T — тепловая энергия. Соответственно внутренняя энергия также представляется в виде суммы двух составляющих $E = E_X + E_T$, где E_X — упругая энергия сжатия, которая описывается формулой: $E_X = \int_{\rho_0}^{\rho} P_X \rho^2 d\rho$, где ρ_0 — плотность в начальный момент времени; а E_T — тепловая составляющая внутренней энергии, $E_T = cT$, c — удельная теплоемкость.

Уравнение состояния для пористого вещества. В табл. 1 приведены параметры уравнений состояния веществ, используемых в расчетах.

Таблица 1. Параметры уравнений состояния.

вещество	воздух	медь	вольфрам
$\rho_{i0}, \text{кг/м}^3$	1.3	$8.93 \cdot 10^3$	$19.235 \cdot 10^3$
$A_i, \text{Па}$	$0.695 \cdot 10^{-3}$	$347.5 \cdot 10^8$	$774.8 \cdot 10^8$
n_i	2.2	4.0	4.0
$c_i, \text{кДж/кг} \cdot \text{К}$	0.718	0.382	0.152
γ_i	2	2	2

Уравнения состояния компонентов нормируются так, чтобы при нормальных условиях ($P = 1 \text{ атм}$ и $T = 300^\circ \text{К}$) давления и энергии фаз были равны нулю, т.е.

$$P = A_i \left[\left(\frac{\rho_{ii}}{\rho_{i0}} \right)^{n_i} - 1 \right] + \gamma_i \rho_{ii} c_i (T - 300),$$

$$E = E_{X_i} + c_i (T - 300),$$

где ρ_{ii}, ρ_{i0} — истинная плотность и истинная начальная плотность; c_i — удельная теплоемкость,