

ЛИТЕРАТУРА

1. Горобцов В. Г., Козорезов К. И., Ушеренко С. М. Исследование влияния бомбардировки микрочастицами на структуру стальной мишени // Порошковая металлургия.— Вып. 6.— М.: Высш. шк., 1982.
2. Козорезов К. И., Максименко В. И., Ушеренко С. М. Исследование эффектов взаимодействия дискретных микрочастиц с твердым телом // Избранные вопросы современной механики.— 1981.— Ч. 1.
3. Удар, взрыв и разрушение // Сер. Механика. Новое в зарубежной науке.— № 26.— М.: Мир, 1981.
4. Забабахин Е. И., Забабахин П. Е. Стационарное перемещение тела ударной волной // ПМТФ.— 1980.— № 2.
5. Башуров В. В., Скоркин Н. А. Задача о сферическом поршне в упруго-пластической среде // ЧММСС.— Т. 5, № 5.— Новосибирск, 1974.
6. Андзелевко С. К., Горобцов В. Г., Козорезов К. И. и др. Исследование эффектов взаимодействия микрочастиц с метааллической мишенью в условиях высоких давлений // Физика и техника высоких давлений.— 1985.— Вып. 17.
7. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений.— М.: Наука, 1966.
8. Бануров В. В., Скоркин Н. А. Осесимметричная задача о проникании жестких тел вращения в деформируемые преграды // ФТПРПИ.— 1981.— № 4.
9. Гулидов А. И., Фомин В. М. Проникание абсолютно твердого тела в упруго-пластическую преграду // Тез. докл. VII Всесоюз. конф. по прочности и пластичности.— Горький, 1978.
10. Уилкинс М. Л. Расчет упруго-пластических течений // Вычислительные методы в гидродинамике.— М.: Мир, 1967.
11. Башуров В. В., Вахрамеев Ю. С., Демьяновский С. В. и др. Модель грунта и вычислительный комплекс для расчета подземных взрывов // ПМТФ.— 1979.— № 3.
12. Майнчен Дж., Сак С. Метод расчета «Тензор» // Вычислительные методы в гидродинамике.— М.: Мир, 1967.
13. Андреев С. Г., Башуров В. В., Свидинский В. А. и др. Модификация метода Глимма к задачам проникания // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методы и программы численного решения задач мат. физики.— 1985.— Вып. 3.
14. Finite-difference techniques for vectorized fluid dynamics calculations // Ed. by David L. Book.— N. Y., 1981.
15. Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике.— М., 1968.
16. Башуров В. В., Скоркин Н. А. Математическое моделирование проникания осесимметричного тела в преграду // ЧММСС.— Т. 13, № 2.— Новосибирск, 1982.
17. Симоненко В. А., Скоркин Н. А., Башуров В. В. О проникновении отдельных микрочастиц // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика.— 1988.— Вып. 1.

г. Челябинск

Поступила в редакцию 22/1 1990

УДК 534.222.2 + 532.542.2

С. П. Медведев, А. Н. Поленов, Б. Е. Гельфанд

ПАРАМЕТРЫ УВ ПРИ ВЗРЫВНОМ РАСШИРЕНИИ ВСКИПАЮЩЕЙ ЖИДКОСТИ

На ударной трубе с обогреваемой камерой высокого давления измерены параметры плоских УВ, формирующихся при разлете объема перегретой по отношению к внешним условиям жидкости. Показано, что основной вклад в импульс фазы сжатия УВ при разлете стратифицированной системы жидкость — насыщенный пар вносит процесс испарения жидкой составляющей. Амплитуда волны определяется отношением давлений между разлетающимся объемом и окружающей средой и слабо зависит от свойств жидкости.

Исследование параметров ударных волн (УВ), формирующихся в окружающем пространстве при внезапном расширении объема перегретой (по отношению к внешним условиям) жидкости, представляет интерес для моделирования аварийной ситуации с истечением теплоносителя. При потере герметичности в такой системе начинается интенсивное парообразование. К формированию УВ в присоединенном объеме может привести достаточно быстрое расширение образующегося парок капельного

облака. При анализе выброса вскипающей жидкости из герметичной емкости, как правило, основное внимание уделяется испарению [1, 2] и динамике падения давления в емкости [3, 4]. Систематические сведения о параметрах исходящих из разрушенного объема волн давления и УВ в литературе отсутствуют. Тем не менее, косвенные наблюдения [1] свидетельствуют о реальности значительного механического действия при взрывном расширении вскипающей жидкости.

В [5] предложено исследовать ударно-волновые характеристики рассматриваемого процесса на ударной трубе с обогреваемой камерой высокого давления (КВД). В [5, 6] определены структура и амплитуда УВ и волн разрежения, формирующихся при разлете высокотемпературной системы вода — насыщенный пар. Оказалось, что характерная особенность УВ — большая величина длительности (импульса) фазы сжатия, вследствие этого на ударных трубах [5, 6] не удалось измерить импульсные параметры УВ. В настоящей работе описана модификация установок [5, 6], предназначенная для исследования плоских УВ конечной длительности. Определены зависимости амплитудных и импульсных характеристик УВ от основных параметров разлетающейся системы. Опыты проведены с тремя различными веществами в широком диапазоне давлений (температур).

Экспериментальная установка и результаты опытов

Эксперименты проводились на вертикальной ударной трубе длиной 3 м с диаметром канала 50 мм (рис. 1). КВД трубы составлена из двух герметично состыкованных секций — нагревательной (НК) и рабочей камер (РК). НК 9 оснащена электронагревателем 10 и заполнена водой, используемой в качестве теплоносителя. Температура воды измерялась термопарой 11. РК выполнена в виде алюминиевого стакана 8, погруженного в теплоноситель и заполненного определенным количеством исследуемой рабочей жидкости (РЖ). РК отделена от камеры низкого давления (КНД) 5 разрывной мембраной 7. Во всех опытах КНД первоначально заполнена воздухом при температуре $T_1 = 300$ К и давлении $p_1 = 0,1$ МПа.

В процессе нагрева теплоносителя (время достижения рабочей температуры составляло 10—30 мин) температура и давление в РК повышаются в соответствие с параметрами жидкости на линии насыщения. При заданном давлении p_4 (температура T_4) мембрана разрывается и исследуемая жидкость оказывается перегретой по отношению к условиям в КНД. При истечении вскипающей жидкости в КНД формируется волна давления, параметры которой измеряются пьезоэлектрическими датчиками 2—6 и фотодатчиком 1 с лампой подсветки. Расстояние от мембраны до запускающего датчика 6 — 0,1—0,2 м, между датчиками 0,24 м. Максимальное давление в РК — 6 МПа, температура — до 550 К.

Описанная схема отличается от [5, 6] значительным уменьшением разлетающегося объема, что позволяет получить относительно короткие волны и измерить импульс (длительность) фазы сжатия УВ. Для удобства определения импульса в месте расположения датчика 3 смонтирован дублирующий датчик (не показан на рис. 1), сопряженный с электронным интегратором, собранным на операционных усилителях.

В опытах варьировались давление разрыва мембраны p_4 , объем рабочей камеры $V = 26, 41$ и 70 см³, масса m и свойства рабочей жидкости. В таблице представлены основные параметры исследуемых РЖ (округленные данные [7, 8]) — молекулярный вес μ , нормальная температура кипения

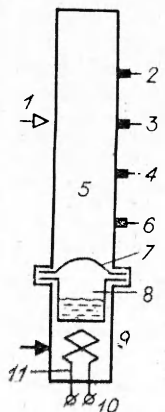


Рис. 1. Схема экспериментальной установки.

Жидкость	μ	T_s, K	$\rho_s, \text{кг/м}^3$	$T_{кр}, K$	$\rho_{кр}, \text{кг/м}^3$	$A, \text{кг/м}^3 \cdot K$	$B, \text{кг/м}^3$
Вода	18	373	958	647	318	1,175	1396
Этанол	46	351	757	521	267	1,312	1217
Фреон-113	187	321	1510	487	576	2,157	2202

ния T_s , плотность жидкой фазы ρ_s при температуре T_s , критическая температура $T_{кр}$, критическая плотность $\rho_{кр}$. Коэффициенты A, B определены ниже.

Особенность проведенных опытов состоит в том, что жидкая фаза заполняет РК частично. Объем выше уровня жидкости занят паровоздушной смесью. В [1] выделено два основных случая аварийного разрыва емкостей с легкоиспаряющейся жидкостью — пробой выше и ниже уровня жидкости. Представляет интерес сравнение параметров волн давления в обоих случаях. Разрыв мембраны моделирует пробой выше уровня жидкости, когда КВД расположена в нижней части ударной трубы (как показано на рис. 1). Для реализации второго случая КВД монтировалась в верхней части трубы. На рис. 2, *a, б* приведены осциллограммы записи давления датчиком, расположенным на расстоянии 0,83 м от мембраны. Рис. 2, *a* соответствует случаю, когда КВД расположена в нижней, а рис. 2, *б* — в верхней части КВД. Как видно, при прочих равных условиях (т. е. одинаковых величинах m, V, p_1) амплитуда и длительность (импульс) волн в обоих случаях приблизительно равны, однако структура возмущений различна. На рис. 2, *a* видна двухфронтная конфигурация, аналогичная [5, 6]. Лидирующая УВ треугольного профиля обусловлена разлетом паровоздушной прослойки. Далее следует относительно медленное повышение давления до некоторого значения $p_2 = p_1 + \Delta p_2$, которое определяется процессом расширения в КВД парок капельного облака, образующегося при вскипании жидкой фазы. При непосредственном разлете перегретой жидкости (см. рис. 2, *б*) формируется волна сжатия без выраженного ударного фронта. Заметим, что по [1] ситуация с разрывом оболочки выше уровня жидкости на практике встречается чаще, поскольку, как правило, стенка резервуара, не находящаяся в контакте с жидкой фазой, менее прочна по отношению к внешним тепловым и механическим воздействиям. Базовой схемой организа-

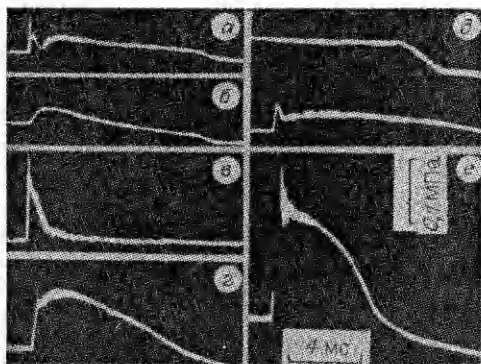


Рис. 2. Осциллограммы записи давления. *a, б* — Ф-113, $m = 12$ г, $V = 26$ см³, $p_1 = 0,5$ МПа; *в* — вода, 5 г, 41 см³, 1,5 МПа; *г* — вода, 22 г, 41 см³, 1,5 МПа; *д* — нижний луч; этанол, 22 г, 76 см³, 0,5 МПа (верхний луч — сигнал фотодатчика); *е* — этанол, 22 г, 76 см³, 3,1 МПа.

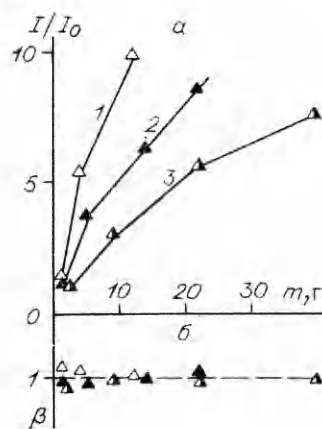


Рис. 3. Зависимость относительного импульса (*a*) и интенсивности УВ (*б*) от массы воды.

$V, \text{см}^3$: 1 — 26, 2 — 43, 3 — 70; $I_0, \text{Па} \cdot \text{с}$: 1 — 35, 2 — 60, 3 — 100.

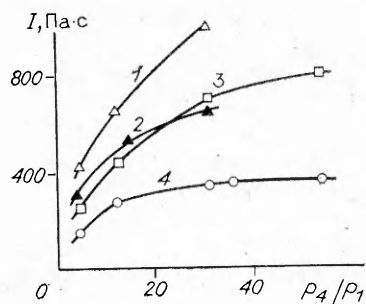


Рис. 4. Зависимость I (p_4/p_1).
 V , см³: 1 — 70 (вода), 2 — 41 (вода), 3 — 70 (этанол), 4 — 41 (фреон-113).

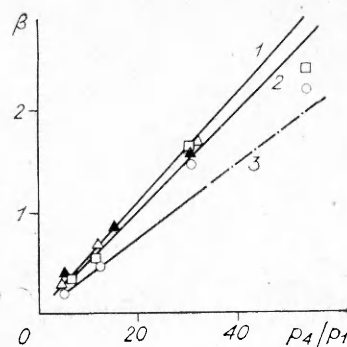


Рис. 5. Зависимость интенсивности УВ от отношения давлений на мембране.
 1 — этанол, $\gamma = 1,1$; 2 — вода, $\gamma = 1,3$; 3 — фреон-113, $\gamma = 1,08$.

ции эксперимента являлась установка с КВД, расположенной в нижней части КНД. По осциллограммам определяли следующие параметры УВ: $\beta = \Delta p_2/p_1$ (Δp_2 — избыточное по отношению к величине p_1 давление на «полке» за лидирующей волной треугольного профиля), I — импульс фазы сжатия УВ.

Рис. 2, в, г иллюстрирует влияние массы жидкости на параметры УВ. Здесь и далее приведены результаты измерений датчиком, расположенным на расстоянии 0,68 м от мембраны (см. рис. 1, з). Видно, что с увеличением m значительно возрастает длительность (импульс) УВ, в то время как амплитуда УВ практически не изменяется. На рис. 3 представлены экспериментальные зависимости относительного импульса и интенсивности УВ от массы воды ($p_4 = 1,4$ — $1,6$ МПа, $T_4 = 460$ — 470 К). Величина I_0 для фиксированного объема РК получена методом экстраполяции и соответствует значению импульса УВ при разлете объема, заполненного насыщенным паром в отсутствие жидкой фазы в момент разрыва мембраны. Из рис. 3, а следует, что вклад процесса массопотока от испаряющейся жидкости в формирование импульсных характеристик УВ становится доминирующим уже при незначительных величинах m . При объемной доле жидкости порядка 50 % импульс волны в 7—10 раз превышает значение I_0 . Измеренные величины β (рис. 3, б) практически не зависят от массы жидкости и, таким образом, значительное увеличение импульса УВ обусловлено ростом длительности фазы сжатия.

Для практических целей представляет интерес зависимость параметров УВ от отношения давлений на мембране. Рис. 2, д (нижний луч), е на примере этанола иллюстрирует обнаруженную характерную особенность — при фиксированных массе жидкости и объеме РК с ростом отношения p_4/p_1 (T_4/T_1) интенсивность волны увеличивается, а длительность уменьшается. Достаточно резкое возрастание параметра β обуславливает общее суммарное увеличение импульса УВ. На рис. 4 приведены зависимости импульса ударной волны от отношения давлений на мембране. Параметры исследуемых веществ на линии насыщения существенно различны [7, 8]. Для удобства сравнения и практических выводов представлены результаты опытов с фиксированной величиной $m = 22$ г. Анализ экспериментальных данных показывает, что импульс фазы сжатия УВ растет с увеличением объема РК и уменьшением молекулярного веса жидкости. Влияние отношения p_4/p_1 на амплитуду волны (рис. 5) имеет другой характер. Интенсивность УВ растет с повышением давления в КВД и практически не зависит от характеристик жидкости и объема рабочей камеры. Следовательно, отличие импульсов при разлете воды и фреона-113 (или воды и этанола) связано, главным образом, с разницей длительности фазы сжатия. С уменьшением молекулярного веса жидкости длительность волны увеличивается.

Обсуждение результатов

На основе анализа результатов экспериментов (см. рис. 2—5), а также данных [3—6] можно предложить следующую схему процесса нестационарного расширения вскипающей жидкости. На первом этапе по неподвижной однофазной жидкой среде распространяется быстрая волна разрежения с акустической скоростью порядка 10^3 м/с. При этом в КВД формируется слабая УВ, параметры которой определяются сжимаемостью жидкой фазы. На втором этапе вследствие падения давления ниже давления насыщения начинается образование и рост пузырьков. При истечении двухфазной (пузырьковой) среды по КВД распространяется медленная волна разрежения со скоростью ~ 10 м/с. В КВД формируется волна сжатия, причем из-за конечного времени роста пузырьков и запаздывания вскипания [4] эта волна, по крайней мере вблизи разлетающегося объема, может не иметь выраженного ударного фронта. Отметим, что наличие двухфазного течения в КВД обуславливает резкое уменьшение освещенности фотодатчика (см. рис. 2, δ , верхний луч) в момент прихода к месту измерения контактной поверхности УВ.

При расчете параметров УВ, формирующихся на первом этапе, воспользуемся результатами [9], где получено соотношение для оценки интенсивности УВ в ударной трубе, КВД которой заполнена жидкостью, причем предполагается отсутствие фазовых переходов в процессе нестационарного расширения. В обозначениях, принятых в настоящей работе, выражение [9] имеет следующий вид:

$$\frac{p_4}{p_1} + \frac{G}{p_1} = \left(1 + \beta + \frac{G}{p_1}\right) \left[1 - \frac{n-1}{2\gamma_1} \frac{a_1}{a_4} \beta \left(1 + \frac{\gamma_1+1}{2\gamma_1} \beta\right)^{-\frac{1}{2}}\right]^{-\frac{2n}{n-1}}. \quad (1)$$

Здесь a_1 , γ_1 — скорость звука и отношение удельных теплоемкостей газа в КВД. Параметры G , n взяты из эмпирического уравнения состояния жидкости $p = G[(\rho/\rho_0)^n - 1]$ (ρ_0 — начальная плотность жидкости, p , ρ — текущие давление и плотность). Для воды по [9] $n = 7,15$, $G = 301$ МПа и $a_4 = [n(p_4 + G)\rho^{-1}]^{1/2}$. Например, при $p_4/p_1 = 50$ имеем $\beta \approx 0,001$, что на 2—3 порядка меньше измеряемых значений (см. рис. 3). Таким образом, начальный этап расширения вскипающей жидкости обуславливает формирование слабого акустического предвестника, скорость распространения которого близка к скорости звука в окружающей среде. При $G = 0$, $n = \gamma_4$ соотношение (1) сводится к известной в теории идеальной ударной трубы зависимости интенсивности УВ от начального отношения давлений на мембране, где a_4 , γ_4 — скорость звука и отношение теплоемкостей газа КВД.

При описании доминирующего второго этапа — расширения из КВД двухфазной среды — воспользуемся предположением о равновесном по скорости и температуре истечении. Такая схема по [4] дает удовлетворительное согласие с экспериментальными данными по опорожнению трубопровода, заполненного нагретой жидкостью и, следовательно, может быть применена для оценки интенсивности УВ в присоединенном объеме. В этом случае, по аналогии с [6], в (1) необходимо подставить «равновесные» значения «эффективного» показателя $\gamma_4 = \gamma(1 + \eta\delta)(1 + \gamma\eta\delta)^{-1}$ и скорости звука в КВД $a_4^2 = \gamma_4 a^2 [\gamma(1 + \eta)]^{-1}$ (η , δ — отношение масс и теплоемкостей конденсированной и паровой фаз, a , γ — параметры несущей паровой фазы; предполагается, что смесь подчиняется уравнению Клайперона — Клаузиуса, жидкая фаза несжимаема и фазовые переходы отсутствуют). Для исследуемых жидкостей $\gamma \approx 1,08 \div 1,3$, $\delta \approx 1$. Таким образом, при $\eta > 1$ имеем $0 < (\gamma_4 - 1) < 0,04 - 0,15$. Раскладывая правую часть (1) (при $G = 0$) в ряд по малому параметру $(\gamma_4 - 1)$ и ограничиваясь первым членом разложения, имеем:

$$\frac{p_4}{p_1} = (1 + \beta) \exp \left[\frac{a_1}{a_4} \frac{\beta}{\gamma_1} \left(1 + \frac{\gamma_1+1}{2\gamma_1} \beta\right)^{-\frac{1}{2}} \right]. \quad (2)$$

В таком упрощенном виде функциональное соотношение между начальным отношением давлений и интенсивностью ударной волны более пригодно для практических оценок, поскольку из рассмотрения исключается ряд параметров толкающей среды. Перепишем выражение для «равновесной» скорости звука a_4 через p_4 и плотность несущей паровой фазы ρ_v : $a_4 = [\gamma_4 p_4 \rho_v^{-1} (1 + \eta)^{-1}]^{1/2}$. Абсолютная величина «эффективного» показателя γ_4 слабо зависит от η , поэтому для максимальных оценок a_4 положим $\gamma_4 - \gamma = \text{const}$, тогда

$$a_4 = [\gamma p_4 / \rho_v (1 + \eta)]^{1/2}. \quad (3)$$

Параметр η удобно определить через плотности паровой и жидкой фаз ρ_v и ρ_L и объемное паросодержание φ в КВД: $\eta = \rho_L (1 - \varphi) \rho_v^{-1} \varphi^{-1}$. По данным [3], вдали от критической области (при $T_4 < 0,9T_{кр}$) $\varphi = 0,5 \div 0,8$. Для приближенных оценок положим $\varphi \approx 0,66$, следовательно, $\eta \approx \rho_L (2\rho_v)^{-1} (\rho_L \gg \rho_v)$. Вблизи критической области ($0,9T_{кр} < T_4 < T_{кр}$) интенсивность парообразования резко возрастает из-за наличия гомогенного флуктуационного зародышеобразования [2], что дает $\varphi \approx 1$. Кроме того, при $T_4 \geq T_{кр}$ исчезает различие между фазами, т. е. $\rho_L = \rho_v$. Таким образом, при $T_4 \geq 0,9T_{кр}$ имеем $\eta \approx 0$. Простое ашпроксимационное выражение для параметра η , справедливое в диапазоне $T_4 > T_s$, имеет вид

$$\eta = (\rho_L - \rho_v) / 2\rho_v. \quad (4)$$

Подставляя (4) в (3), получим

$$a_4 = [2\gamma p_4 / (\rho_v + \rho_L)]^{1/2}. \quad (5)$$

Формула (5) малоприменна для практического использования, поскольку для конкретного вещества часто заранее неизвестна температурная зависимость величин ρ_v и ρ_L . Целесообразно воспользоваться известным правилом прямолинейного диаметра [7], согласно которому сумма плотностей жидкой и паровой фаз на линии насыщения есть линейная функция температуры: $\rho_v + \rho_L \approx B - AT_4$. Таким образом, имеем

$$a_4 = [2\gamma p_4 / (B - AT_4)]^{1/2}, \quad (6)$$

где коэффициенты A , B определяются табличными значениями ρ_s , T_s , $\rho_{кр}$, $T_{кр}$:

$$A = (\rho_s - 2\rho_{кр}) / (T_{кр} - T_s), \quad B = 2\rho_{кр} + AT_{кр}. \quad (7)$$

Результаты расчетов по (2), (6), (7) представлены на рис. 5. Сравнение с экспериментальными данными показывает, что предложенная методика может быть использована для оценки интенсивности УВ. Отметим, что зависимость (2) удовлетворительно согласуется с опытом и в области закритических температур (штрихпунктирная часть кривой 3).

Итак, проведено исследование амплитудно-импульсных характеристик плоских ударных волн, формирующихся при взрывном расширении вскипающей жидкости. Показано, что основной вклад в импульс фазы сжатия УВ при разлете стратифицированной системы жидкость — насыщенный пар вносит процесс испарения жидкой составляющей. При фиксированном начальном давлении амплитуда УВ не изменяется, а импульс (длительность) возрастает с увеличением массы жидкости. Установлено, что амплитуда волны слабо зависит от свойств жидкости и, в основном, определяется отношением давлений между разлетающимся объемом и окружающей средой. Импульс (длительность) УВ растет с увеличением отношения давлений и с уменьшением молекулярного веса жидкости. Предложена методика приближенного расчета интенсивности УВ, дающая удовлетворительное согласие с экспериментальными результатами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Маршал В. Основные опасности химических производств.— М.: Мир, 1989.
2. Исаев О. А., Неволин М. В., Скрипов В. П. и др. // ПМТФ.— 1988.— № 4.— С. 72.
3. Edwards A. R., O'Brien T. P. // J. British Nuclear Ener. Soc.— 1970.— 9, N 2.— P. 125.

4. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред.— Ч. 2.— М.: Наука, 1987.
5. Гельфанд Б. Е., Медведев С. П., Фролов С. М. // Докл. АН СССР.— 1988.— 301, № 6.— С. 1413.
6. Гельфанд Б. Е., Медведев С. П., Поленов А. Н. и др. // ТВТ.— 1989.— 27, № 6.— С. 1159.
7. Холодильная техника.— Кн. 1.— Л.: Госторгиздат, 1960.
8. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей.— М.: Наука, 1972.
9. Nayfeh A. H., Hassan S. D. // J. Mecanique.— 1969.— 8, N 2.— P. 193.

г. Москва

Поступила в редакцию 3/IV 1990

УДК 535.338.4

В. С. Демиденко, Л. Ф. Скоренцев, Е. Ю. Мурышев,
Г. И. Сыренков

РАСЧЕТ $p-v$ -ИЗОТЕРМ ЖЕЛЕЗА С НИКЕЛЕМ И ХРОМОМ И ПАРЦИАЛЬНЫХ ВКЛАДОВ В НИХ ЭЛЕКТРОННЫХ s -, d -ПОДСИСТЕМ

На основе обобщенных на случай магнетизма уравнений Петтифора проведено теоретическое исследование $p-v$ -изотерм железа, никеля, хрома и сплавов $Fe_{0.7}Cr_{0.3}$ и $Fe_{0.7}Ni_{0.3}$. Такой подход позволил проанализировать аномалии изотерм, связанные с фазовыми переходами ОЦК — ПУ посредством выделения парциальных вкладов s и d электронных подсистем, предложить концепцию «коллапсированных структур». Используемый метод применим для ряда других металлов и их сплавов.

Сплавы на основе железа представляют большой класс материалов, эффективно используемых в технике. В ряде случаев эти сплавы подвергаются интенсивным нагрузкам и претерпевают превращения, существенно влияющие на весь комплекс физико-механических свойств. Систематизация этих эффектов на основе экспериментов с целью прогноза новых явлений, составов с оптимальными характеристиками сложна, трудоемка и не имеет достаточной общности. В этой ситуации особую роль играет разработка методов теоретического описания поведения сплавов и, в частности, в условиях всестороннего давления.

В данной работе исследуются возможности электронной теории твердого тела в применении к системам, сложность которых связана с наличием электронных s - и d -подсистем, обуславливающих магнетизм, превращения типа решетка — решетка. Поскольку конечный результат определяется разностью весьма больших величин, то необходимо использовать методы, обеспечивающие достаточно адекватное представление физики формирования твердого тела из свободных атомов. В принципе современное состояние электронной теории при использовании самосогласованных методов расчета дает фундаментальную основу для решения поставленной задачи. Однако ряд проблем собственно теории, трудоемкость этих методов, особенно в случае сплавов, делает нереальным их использование в прогнозе закономерностей, прикладных задачах.

Наряду с этим в последние годы созданы и широко апробированы методы, успешно моделирующие электронную структуру магнитных сплавов переходных элементов, межатомное взаимодействие в них [1—4]. Наряду с этим развиты теории, обеспечивающие расчет уравнений состояния немагнитных переходных металлов [5, 6] и сплавов [7].

Особенность предлагаемого подхода — комплексное использование концепции ренормализованного атома [8] и приближения когерентного потенциала [1—3, 9] для случая магнитных сплавов переходных элементов с учетом энергетической конкуренции их кристаллических структур. Последнее обстоятельство, как известно [10], эффективно используется в технических приложениях, но не имеет достаточной теоретической основы. Известные попытки объяснения структурных переходов под