

УДК 539.63

ИЗОТЕРМА АЛЮМИНИЯ, ПОСТРОЕННАЯ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ГРЮНАЙЗЕНА

С. Д. Гилёв

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, gilev@hydro.nsc.ru

Рассматривается метод построения кривой холодного сжатия и изотермы металла на основе обобщенного уравнения для коэффициента Грюнайзена. В отличие от известных подходов, предложено учесть изменение характера взаимодействия атомов в кристалле при сжатии. Для этого безразмерный параметр t в обобщенном уравнении рассматривается как функция сжатия. Экспериментальные данные по сжимаемости металлов свидетельствуют, что параметр t увеличивается с ростом плотности. Найдены свободные параметры модели для алюминия. Настоящий подход позволяет описать изотерму алюминия с более высокой точностью и в более широком диапазоне плотности. Для кривой холодного сжатия рабочая область модели увеличена почти на порядок величины по плотности и более чем на два порядка по давлению (по сравнению с моделью, в которой параметр t полагался постоянным).

Ключевые слова: коэффициент Грюнайзена, изотерма, кривая холодного сжатия, большое давление, малопараметрическое уравнение состояния.

DOI 10.15372/FGV20220212

ВВЕДЕНИЕ

Ключевым параметром при описании состояния конденсированного вещества в области больших давлений и температур является коэффициент Грюнайзена (см., например, [1–3]). В модели Ми — Грюнайзена коэффициент Грюнайзена определяет соотношение между тепловыми составляющими давления и внутренней энергии. Для того чтобы найти параметры состояния вещества при сильном ударном сжатии, кроме коэффициента Грюнайзена необходимо знать кривую холодного сжатия $p_c(V)$ (p_c — холодное давление, V — удельный объем), а также описать тепловой компонент свободной энергии.

С шестидесятых годов прошлого века известно обобщенное модельное уравнение [1], связывающее коэффициент Грюнайзена γ и давление холодного сжатия p_c :

$$\gamma(V) = -\frac{V}{2} \frac{\partial^2(p_c V^{2t/3}) \partial V^2}{\partial(p_c V^{2t/3}) \partial V} + \frac{t-2}{3}, \quad (1)$$

где t — безразмерный параметр, характеризующий тип колебаний кристаллической решетки. При разных значениях t формула описывает следующие теоретические модели кон-

денсированного вещества: Слэтера — Ландау ($t = 0$), Дугдейла — Мак-Доналда ($t = 1$), Зубарева — Ващенко ($t = 2$). Данные модели основаны на различных предположениях о поведении вещества. Модель Слэтера — Ландау принимает неизменность коэффициента Пуассона при сжатии. В модели Дугдейла — Мак-Доналда полагается, что кристалл имеет кубическую решетку, а взаимодействие между атомами имеет специальную форму. В модели Зубарева — Ващенко рассматриваются трехмерные колебания решетки с межатомным взаимодействием, описываемым ангармоничным центральным потенциалом. Считается [2, 3], что первые две модели лучше описывают поведение твердого тела, а третья — жидкой фазы.

Отметим основные особенности уравнения (1), выявленные многими исследователями в ходе его практического использования для описания сжатия конденсированных веществ (см., в частности, [2–7] и цитированную там литературу).

1. Ни одна из трех упомянутых моделей для коэффициента Грюнайзена не имеет явного преимущества перед другими. Для разных веществ наиболее подходящими оказываются различные модели. Поиск наилучшей модели для данного вещества превращается в отдель-

ную задачу.

2. Как правило, формула (1) при $t = 0, 1, 2$ не дает возможности найти правильное значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях ($p = p_0, T = T_0, V = V_0$, где $p_0 \approx 10^5$ Па — нормальное атмосферное давление, $T_0 = 293$ К — комнатная температура, V_0 — удельный объем вещества в этих условиях). Условие согласования правой части уравнения (1) с известным значением коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях приводит к необходимости введения корректировочной константы в правую часть уравнения (1) [2].

3. Оптимальное значение параметра t для конкретного вещества чаще всего оказывается нецелочисленным. В ряде случаев найденное значение t оказывается отрицательным [4], что означает уменьшение показателя Пуассона с ростом давления.

4. В области больших сжатий вещества результаты, получаемые по (1), сближаются между собой в разных моделях.

Отдельно обсудим работы [5, 8–12], в которых рассматривался вопрос о возможном изменении параметра t при сжатии.

В [8] изучалась зависимость параметра Грюнайзена от сжатия для свинца, индия и олова в диапазоне давлений до 4 ГПа. Обнаружено, что зависимость почти идентична для всех исследованных металлов, но не описывается обобщенной формулой с постоянным значением параметра t . Модель Слэтера дает наиболее точное описание при малых сжатиях, в то время как модель Дугдейла — Мак-Доналда оптимальна при более высоких сжатиях. Сделано предположение, что формулы, соответствующие $t = 0, 1, 2$, можно объединить, если положить параметр t зависящим от удельного объема.

В [5] показано, что ни одна из трех моделей не описывает адекватным образом изменение коэффициента Грюнайзена при сжатии металлов. Автор предложил функцию Грюнайзена, зависящую от параметра t , однако последний остался неизвестным.

В работе [9] на основе анализа экспериментальных ударных адиабат найдена зависимость коэффициента Грюнайзена от удельного объема $\gamma(V)$ для Al, Cu, Ta. Сравнением полученной зависимости с предсказаниями трех моделей (Слэтера — Ландау, Дугдейла — Мак-Доналда, Зубарева — Ващенко) показа-

но, что при ударном сжатии найденная зависимость последовательно пересекает предсказания моделей в направлении увеличения параметра t , постепенно приближаясь к зависимости, соответствующей модели Зубарева — Ващенко. Это означает, что при сжатии происходит увеличение параметра t .

В работе [10] предложена зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности в виде суммы трех слагаемых с двумя свободными параметрами. Для связи коэффициента Грюнайзена с холодным давлением использовалась модель [11], в которой параметр t неявным образом зависит от плотности. Значение t при бесконечном сжатии оказалось равным 2.5.

В обзоре [12] показано, что параметр t может увеличиваться и достигать значений $2.3 \div 2.5$ при сильном сжатии.

Таким образом, имеющиеся на сегодняшний день опытные данные указывают на то, что параметр t не является постоянным, а изменяется при сжатии (по-видимому, увеличивается). При малых степенях сжатия модель Слэтера — Ландау (соответствующая постоянству коэффициента Пуассона) может давать удовлетворительные результаты. При больших сжатиях это приближение перестает «работать». Это означает, что при сжатии изменяется характер взаимодействия атомов в кристалле и моды колебаний кристаллической решетки.

Целью настоящей работы является построение кривой холодного сжатия и нормальной изотермы на основе обобщенного уравнения (1). В отличие от известных работ, сделана попытка учесть изменение параметра t при сжатии. Можно ожидать, что это позволит расширить рабочий диапазон получаемой таким образом изотермы вещества. В настоящей работе предпринята попытка реализовать этот подход для алюминия в рамках полуэмпирического метода, получившего большое распространение для нахождения уравнений состояния твердых тел. Выбор материала обусловлен заметной сжимаемостью алюминия и достаточным количеством данных для сравнения. Дополнительным стимулом для настоящего исследования послужил не очень большой рабочий диапазон малопараметрической модели уравнения состояния алюминия [13], в которой параметр t полагался постоянным.

МОДЕЛЬ

Попробуем описать поведение коэффициента Грюнайзена и параметра t при сжатии. Для этого сначала нужно разобраться с диапазонами изменения этих величин.

Начальные значения коэффициента Грюнайзена и параметра t . При нормальных условиях ($p = p_0$, $T = T_0$, $V = V_0$) значение коэффициента Грюнайзена обычно хорошо известно. Обозначим это значение через $\gamma_0 = \gamma(V_0)$. Для простоты будем считать, что коэффициент Грюнайзена зависит только от удельного объема.

В [2] согласование правой части уравнения (1) со значением коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях γ_0 осуществлялось введением в правую часть уравнения (1) дополнительной константы. При этом значение параметра t принималось фиксированным. Можно пойти другим путем и потребовать, чтобы γ_0 равнялось правой части уравнения (1) при некотором значении параметра $t_0 = t(V_0)$, где $V_0 = V(p_0, T_0)$.

Уравнение (1) можно представить в эквивалентном виде [10, 12]:

$$\gamma(V) = \frac{K'/2 - 1/6 - (t/3)[1 - p_c/(3K)]}{1 - (2t/3)[p_c/(3K)]}, \quad (2)$$

где $K = -V \frac{\partial p}{\partial V}$ — модуль объемного сжатия, $K' = \frac{\partial K}{\partial p}$ — производная от модуля объемного сжатия по давлению при $T = 0$.

Уравнения (1) и (2) могут быть записаны также для изотермы. Рассматривая уравнение (2) для нормальной изотермы ($T = T_0$), можно получить соотношение

$$\gamma_0 = \frac{K'_0}{2} - \frac{1}{6} - \frac{t_0}{3},$$

где $K'_0 = K'(V_0)$ — значение производной K' при $V = V_0$, $T = T_0$.

Пусть зависимость скорости фронта ударной волны D от массовой скорости u для данного вещества описывается линейной зависимостью $D = c + \lambda u$. Величина K'_0 связана с коэффициентом λ следующим образом [14]:

$$K'_0 = 4\lambda - 1.$$

Таким образом, начальное значение t может быть найдено по формуле

$$t_0 = 6\lambda - 2 - 3\gamma_0. \quad (3)$$

Для определения величины λ можно использовать экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию [15]. Поскольку нас интересует лишь начальный участок ударной адиабаты, то из полного набора [15] необходимо взять данные, соответствующие не слишком большим давлениям. Обработка данных [15] для алюминия по методу наименьших квадратов приводит к следующей зависимости волновой скорости от массовой: $D = 5.298 + 1.352u$ (при давлении ударной волны $p_m < 50$ ГПа). Полученная зависимость $D(u)$ близка к приведенной в авторитетном справочнике [16] — $D = 5.333 + 1.356u$ (при $p_m < 210$ ГПа). Различие значений коэффициента λ для этих двух зависимостей лежит в пределах погрешности определения λ . Коэффициент Грюнайзена алюминия при нормальных условиях равен $\gamma_0 = 2.14$ [17]. Найденное согласно (3) начальное значение t , соответствующее $\lambda = 1.352$, составляет $t_0 = -0.32$. Значение λ , приводимое в [16], дает величину коэффициента $t_0 = -0.28$. С учетом погрешности нахождения коэффициента λ можно считать, что начальное значение параметра t близко к -0.3 .

Предельные значения коэффициента Грюнайзена и параметра t при бесконечном давлении. Квантово-механические расчеты дают при больших степенях сжатия зависимость холодного давления от удельного объема в виде [18]

$$p_c(V) = aV^{5/3} \exp(bV^{1/3}), \quad (4)$$

где a и b — положительные константы. Подставляя зависимость (4) в (1), получаем

$$\gamma = \frac{20 - 2t(4 + bV^{1/3}) + 8bV^{1/3} + b^2V^{2/3}}{6(5 - 2t + bV^{1/3})}. \quad (5)$$

В случае $V \rightarrow 0$ из (5) для любого t находим предельное значение коэффициента Грюнайзена $\gamma_\infty \rightarrow 2/3$.

Обратимся к параметру t . При сжатии значение t , как следует из [8–10, 12], увеличивается, однако значение параметра t_∞ , соответствующее бесконечному сжатию, неизвестно. В работе [12] (см. также цитированную там литературу) предельное значение параметра t составляло 2.5.

Изменение параметра t со сжатием. Будем предполагать зависимость параметра t от удельного объема в виде

$$t(V) = t_0 + (t_\infty - t_0)[1 - \exp(-V_*(1/V - 1/V_0))], \quad (6)$$

где V_* — характеристический удельный объем.

Такая зависимость обеспечивает выполнение начального условия $t(V_0) = t_0$ и асимптотику $t(V) \rightarrow t_\infty$ при $V \rightarrow 0$. Свободный параметр V_* задает величину удельного объема, при уменьшении до которой происходит значимый рост параметра t .

Формула (6) не имеет, конечно, строгого обоснования. Она представляет возможную зависимость $t(V)$, удовлетворяющую сформулированным ограничениям на предельные значения параметра t и ожидаемый характер изменения параметра со сжатием. Такое предположение, по-видимому, допустимо в рамках полупырического подхода.

Определение холодного давления. Пусть коэффициент Грюнайзена имеет вид

$$\gamma(V, T) = \gamma_\infty + f(V)g(T). \quad (7)$$

Первое слагаемое представляет собой значение коэффициента Грюнайзена в предельном случае $V \rightarrow 0$, $T \rightarrow \infty$. Второе слагаемое является произведением двух функций, зависящих от удельного объема и температуры. Из физических соображений ясно, что функции $f(V)$ и $g(T)$ должны уменьшаться соответственно при уменьшении удельного объема и увеличении температуры. Используя соотношения (1) и (7) для функции Грюнайзена при $T = 0$, получаем уравнение

$$\gamma_\infty + f(V)g(0) = -\frac{V}{2} \frac{\partial^2 (p_c V^{2t(V)/3})}{\partial (p_c V^{2t(V)/3}) \partial V} + \frac{t(V) - 2}{3}. \quad (8)$$

В этом уравнении параметр t рассматривается как явная функция удельного объема $t = t(V)$. Решая уравнение (8) относительно холодного давления p_c , получаем

$$p_c(x) = x^{-2t(x)/3} \left(C_1 + C_2 \int_1^x \exp(z(s)) ds \right), \quad (9)$$

где

$$z(s) = -2 \left(\gamma_\infty + \frac{2}{3} \right) \ln(s) -$$

$$-2g(0) \int_1^s \frac{f(\tau)}{\tau} d\tau + \frac{2}{3} \int_1^s \frac{t(\tau)}{\tau} d\tau.$$

Здесь используется безразмерная величина $x = V/V_0$, а C_1, C_2 являются константами интегрирования, s, τ, z — переменные интегрирования.

Для функции Грюнайзена, имеющей вид $\gamma(V, T) = \gamma_\infty + Bx^\alpha g(T)$ (B, α — коэффициенты), в предположении $t = \text{const}$ в [13, 19] холодное давление получено в виде

$$p_c(x) = x^{-2t/3} \left(C_1 + C_2 \int_1^x s^{-2\gamma_\infty + (2/3)(t-2)} \times \exp \left(-\frac{2B}{\alpha} g(0) s^\alpha \right) ds \right).$$

Для функции Грюнайзена, имеющей вид $\gamma(x) = 2/3 - 2x/(x - c)$ (c — коэффициент), в предположении $t = 0$ в [20] найдено другое решение для холодного давления. В отличие от рассмотренных частных случаев [13, 19, 20], уравнение (9) представляет собой решение в общем виде, когда параметр t является явной функцией удельного объема $t = t(V)$.

Частный случай зависимости $\gamma(V)$. Рассмотрим коэффициент Грюнайзена в виде

$$\gamma(x) = \gamma_\infty + (\gamma_0 - \gamma_\infty)x^\alpha. \quad (10)$$

Зависимость такого вида, учитывающая зависимость коэффициента Грюнайзена только от плотности, использовалась для построения уравнения состояния вещества в области высоких давлений в [14, 21]. Подобная зависимость, не являясь точной или надежно установленной, описывает качественно поведение коэффициента Грюнайзена при сильном сжатии.

Зависимость параметра t от плотности возьмем в виде, соответствующем уравнению (6):

$$t(x) = t_0 + (t_\infty - t_0)[1 - \exp(-k(1/x - 1))], \quad (11)$$

где $k = V_*/V_0$. В этом случае уравнение (9) приобретает вид

$$p_c(x) = x^{-2t(x)/3} \left(C_1 + C_2 \int_1^x s^{-2(\gamma_\infty + 2/3) + 2/3 t_\infty} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{2(\gamma_0 - \gamma_\infty)}{\alpha} s^\alpha\right) \exp\left[\frac{2}{3} \exp(k) \times \right. \\ \left. \times (t_\infty - t_0) \left(\Gamma(0, k) - \Gamma\left(0, \frac{k}{s}\right)\right)\right] ds, \quad (12)$$

где $\Gamma(s, x)$ — неполная гамма-функция.

Нахождение констант интегрирования и свободных параметров задачи. В настоящей модели имеется две константы интегрирования C_1, C_2 и три свободных параметра α, t_∞, k .

Константы C_1, C_2 в (12) находятся из следующих физических условий:

$$p(V_0, T_0) = p_0, \quad (13)$$

$$-V \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \Big|_{\substack{V = V_0 \\ T = T_0}} = K_{T_0}. \quad (14)$$

Уравнение (13) означает, что давление p при нормальных условиях равно атмосферному давлению p_0 . Уравнение (14) означает, что изотермический модуль объемного сжатия при нормальных условиях равен своему экспериментальному значению K_{T_0} .

Полное давление представлялось в традиционном виде как сумма холодного и теплового компонентов:

$$p(V, T) = p_c(V) + \\ + \frac{\gamma(V)}{V} R \left[\frac{9}{8} \theta_D(V) + 3TD \left(\frac{\theta_D(V)}{T} \right) \right] + \\ + \frac{\gamma_e \chi T^2}{2V} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\gamma_e}. \quad (15)$$

Здесь R — удельная газовая постоянная, θ_D — характеристическая температура Дебая, χ — коэффициент электронной теплоемкости, γ_e — аналог функции Грюнайзена для электронов (полагается постоянной), $D(x)$ — функция Дебая,

$$D\left(\frac{\theta_D}{T}\right) = \frac{3T^3}{\theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} \frac{z^3 dz}{e^z - 1}.$$

Температура Дебая θ_D определяется из известного уравнения $\gamma = -\left(\frac{\partial \ln \theta_D}{\partial \ln V}\right)_T$. Интегрирование этого уравнения дает зависимость характеристической температуры Дебая от удельного объема:

$$\theta_D(V) = \theta_{D0} \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\gamma_\infty} \times \\ \times \exp\left[\frac{\gamma_0 - \gamma_\infty}{\alpha} \left(1 - \left(\frac{V}{V_0}\right)^\alpha\right)\right], \quad (16)$$

где θ_{D0} — характеристическая температура Дебая при нормальных условиях.

Для определения давления по формуле (15) использовались справочные значения констант алюминия при нормальных условиях. Они представлены в таблице и в основном соответствуют [13]. В таблице ρ_{0K} — плотность, при которой холодное давление обращается в нуль, т. е. при $p_c(\rho_{0K}) = 0$.

Сформулированные уравнения (10)–(16) определяют малопараметрическое уравнение состояния. Оно имеет три свободных параметра — α, t_∞, k . Значение α для алюминия взято из модели [13], в которой предполагалось, что параметр t неизменен и равен нулю. Это приближение является начальным, и поэтому естественно результаты предлагаемого подхода сравнить с известной моделью [13]. Оставшиеся два свободных параметра t_∞, k находятся из требования согласования модельных адиабат с известными зависимостями при $T = 0$ и $T = T_0$ до возможно больших степеней сжатия. Найденные значения свободных параметров t_∞, k приведены в таблице.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ АЛЮМИНИЯ

С использованием констант из таблицы выполнены расчеты кривой холодного сжатия и нормальной изотермы алюминия.

На рис. 1 сплошной линией показана зависимость холодного давления от плотности для алюминия, найденная по уравнению (12) при указанных в таблице расчетных параметрах.

Коэффициенты уравнения состояния алюминия

$\rho_0,$ г/см ³	$R,$ кДж/(г·К)	γ_0	γ_∞	$\theta_{D0},$ К	$K_{T_0},$ ГПа	$\chi,$ кДж/(г·К ²)	γ_e	$C_1,$ ГПа	$C_2,$ ГПа	$\rho_{0K},$ г/см ³	α	t_0	t_∞	k
2.71	$3.08 \cdot 10^{-4}$	2.14	2/3	390	72.2	$5.03 \cdot 10^{-8}$	0.5	-1.70919	-367.112	2.77174	1.8	-0.3	0.35	5

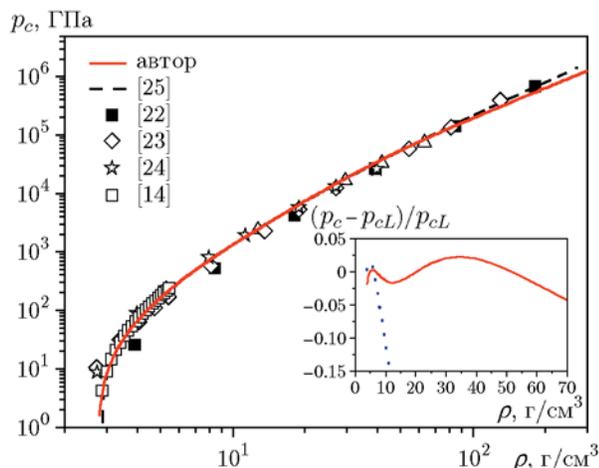


Рис. 1. Зависимость холодного давления от плотности для алюминия:

на врезке: относительное отклонение холодного давления от данных [25]: сплошная кривая — настоящая модель, пунктирная — зависимость при $t = 0$; p_{cL} — холодное давление согласно [25]

Здесь же представлены результаты других авторов [14, 22–25]. Для того чтобы не загромождать рисунок, на нем не приведены известные результаты [26, 27] и ряда других авторов. Они согласуются с основным массивом данных, в частности с [25]. Из рисунка видно, что настоящая модель дает хорошее согласие с известными данными вплоть до плотности ≈ 100 г/см³.

Данные полуэмпирического уравнения состояния [25] охватывают максимальный диапазон изменения параметров, начиная с нулевого давления, и соответствуют при экстремальных плотностях расчетам по модели Томаса — Ферми с градиентными поправками [22]. Поэтому будем сравнивать количественно наши результаты с [25].

Относительное отклонение холодного давления p_c от данных [25] показано на врезке рис. 1. Пунктирная кривая демонстрирует результат для случая $t = 0$, соответствующего модели Слэтера — Ландау. В этом приближении было построено уравнение состояния алюминия в [13]. Сплошная кривая на врезке представляет настоящую модель, в которой параметр t изменяется согласно уравнению (11). Как видно из рисунка, вплоть до плотности ≈ 62 г/см³ (сжатие в 23 раза) разница давлений, определяемых по настоящей модели и по [25], не превышает ± 2.5 %. При большей плотности расхождение с [22, 25] увеличивается и достигает -24 % при плотности 274 г/см³

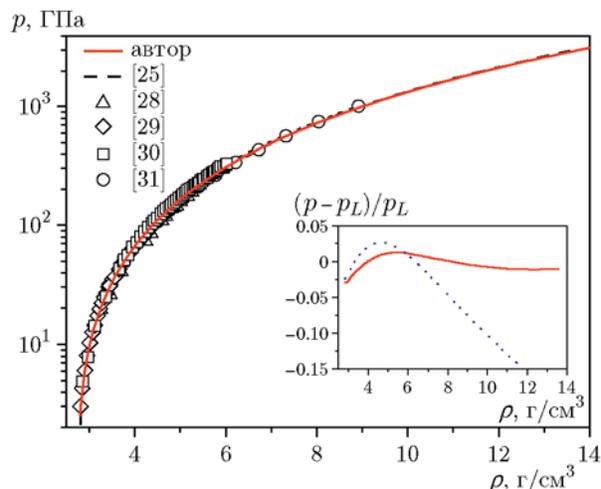


Рис. 2. Зависимость давления при $T = 293$ К от плотности для алюминия:

на врезке: относительное отклонение давления p от данных [25]: сплошная кривая — настоящая модель, пунктирная — зависимость при $t = 0$; p_L — давление на изотерме $T = 293$ К согласно [25]

(максимальное сжатие в [25]). Сравнение двух зависимостей на врезке показывает, что учет изменения параметра t при сжатии позволяет значительно расширить рабочий диапазон малопараметрической модели: в 9 раз по плотности и 180 раз по давлению.

На рис. 2 приведена зависимость давления при температуре $T = 293$ К от плотности. Сплошной линией представлены результаты настоящего моделирования. Здесь же показаны доступные расчетные [25] и экспериментальные [28–31] данные. Степень соответствия модели и имеющихся данных можно оценить как хорошую.

На врезке рис. 2 показано относительное отклонение расчетов от [25] для принятой зависимости параметра t от плотности (11), а также при $t = 0$. Из рисунка видно, что использование модели позволяет значительно улучшить согласие с изотермой [25] по сравнению со случаем $t = 0$. Во всем диапазоне плотности, для которого есть данные, отклонение настоящей модели от [25] не превышает ± 2.5 %.

На рис. 3 представлена использованная в настоящей работе зависимость параметра t от плотности. Как видно из рисунка, параметр t возрастает, изменяясь в не очень больших пределах (согласно таблице, от -0.3 до 0.35). Хотя среднее значение параметра t близко к нулю, как ясно из врезок рис. 1 и 2, использова-

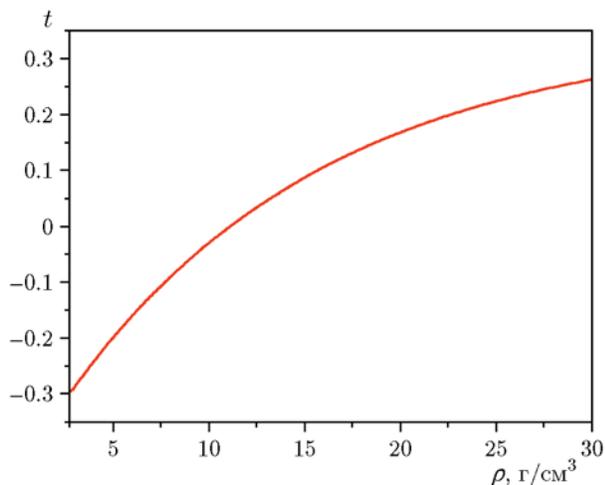


Рис. 3. Зависимость параметра t от плотности для алюминия (расчетные параметры см. в таблице)

ние зависимости (11) дает существенно лучшее согласие давления с известными данными по сравнению со случаем $t = 0$. Это означает, что полуэмпирическая зависимость (11) отражает реальные особенности изменения параметра t при сжатии.

Знак параметра t указывает на поведение коэффициента Пуассона [2, 4]. При $t < 0$ коэффициент Пуассона уменьшается, при $t > 0$ — увеличивается. Поведение параметра t указывает на то, что коэффициент Пуассона при росте плотности изменяется немонокотным образом: сначала уменьшается, а затем увеличивается. Минимальное значение коэффициента Пуассона соответствует $t = 0$, что согласно рис. 3 соответствует плотности ≈ 10.8 г/см³.

На рис. 4 показана зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности для алюминия. Сплошная кривая соответствует принятой в настоящей работе модели. Здесь же приведены доступные на сегодняшний день данные [9, 14, 32–34], полученные на основе результатов экспериментов и моделей уравнений состояния. Из рисунка видно, что сплошная кривая соответствует известным данным (с учетом их погрешности). Поскольку все результаты получены в ударно-волновых экспериментах, то на коэффициент Грюнайзена может влиять также температура ударно-сжатого вещества. Приближение о зависимости коэффициента Грюнайзена только от плотности, использованное в (10), может служить неплохим приближением для сплошного вещества в огра-

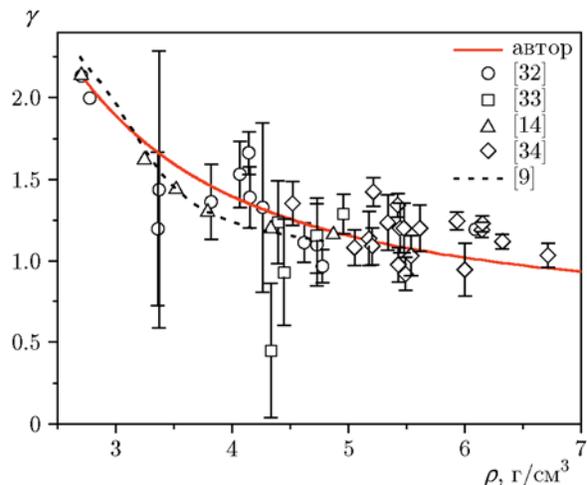


Рис. 4. Зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности для алюминия

ниченной области давления. Для экстремально больших давлений, а также для высокопористых веществ такого приближения уже недостаточно [5, 13, 25].

ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящий подход основан на предположении о зависимости безразмерного параметра t в обобщенном уравнении (1) от плотности. Результаты, полученные с использованием простой экспоненциальной зависимости (11), позволяют лучше описать изотерму алюминия (с большей точностью и в более широком диапазоне плотностей). Рабочая область значительно расширена по сравнению с моделью [13], в которой параметр t полагался постоянным. Для кривой холодного сжатия рабочая область увеличена в 9 раз по плотности и в 180 раз по давлению. Данный результат получен в рамках малопараметрического уравнения состояния, для которого выполнены условия термодинамической согласованности. Настоящие данные показывают, что параметр t монотонно увеличивается с ростом плотности. При этом коэффициент Пуассона для алюминия при повышении плотности изменяется немонокотным образом.

Для алюминия предположение о зависимости параметра t от плотности оказалось весьма эффективным. По всей видимости, это связано с относительно большой сжимаемостью алюминия. Для другого эталонного материала для ударно-волновых экспериментов — меди —

предложенный подход также может быть полезен. Отметим, что вследствие меньшей сжимаемости меди приближение Слэтера — Ландау ($t = 0$) дает неплохие результаты в рамках малопараметрического уравнения состояния [19]. Рассмотрение зависимости параметра t от плотности должно привести к более высокой точности модели и расширению ее рабочей области, но сопровождается увеличением количества свободных констант.

Можно надеяться, что настоящий подход будет полезен для построения изотерм других металлов в области высоких давлений.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Альтшулер Л. В.** Применение ударных волн в физике высоких давлений // *Успехи физ. наук.* — 1965. — Т. 85, вып. 2. — С. 197–258.
2. **Жарков В. Н., Калинин В. А.** Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. — М.: Наука, 1968.
3. **Фортов В. Е.** Уравнения состояния вещества от идеального газа до кварк-глюонной плазмы. — М.: Физматлит, 2012.
4. **Romain J. P., Migault A., Jacqueson J.** Melting curve and Grüneisen coefficient for aluminum // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1980. — V. 41, N 4. — P. 323–326. — DOI: 10.1016/0022-3697(80)90203-6.
5. **Nagayama K., Mori Y.** Simple method of calculating Grüneisen parameter based on the shock Hugoniot data for solids // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1994. — V. 63, N 11. — P. 4070–4077. — DOI: 10.1143/JPSJ.63.4070.
6. **Гударенко Л. Ф., Прялов С. Н.** Аппроксимация потенциального давления на основе обобщенной формулы для коэффициента Грюнайзена // *Хим. физика.* — 1999. — Т. 18, № 10. — С. 52–59.
7. **Ломоносов И. В., Фортова С. В.** Широкодиапазонные полумпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // *Теплофизика высоких температур.* — 2017. — Т. 55, вып. 4. — С. 596–626.
8. **Паршуков А. В.** Измерение коэффициентов Грюнайзена и их зависимости от объема некоторых металлов // *Физика твердого тела.* — 1985. — Т. 27, № 4. — С. 1228–1232.
9. **Wu Q., Jing F.-Q., Li X.-Z.** Behaviour of Grüneisen parameter at high pressure and temperature inferred from shock compression data // *Chin. Phys. Lett.* — 2002. — V. 19. — P. 528–530.
10. **Burakovsky L., Preston D. L.** Analytic model of the Grüneisen parameter all densities // *J. Phys. Chem. Solids.* — 2004. — V. 65, N 8-9. — P. 1581–1587.
11. **Irvine R. D., Stacey F. D.** Pressure dependence of the thermal Grüneisen parameter, with application to the Earth's lower mantle and outer core // *Phys. Earth Planetary Interiors.* — 1975. — V. 11, N 2. — P. 157–165.
12. **Stacey F. D., Hodgkinson J. H.** Thermodynamics with the Grüneisen parameter: Fundamentals and applications to high pressure physics and geophysics // *Phys. Earth Planetary Interiors.* — 2019. — V. 286. — P. 42–68.
13. **Гилев С. Д.** Малопараметрическое уравнение состояния алюминия // *Теплофизика высоких температур.* — 2020. — Т. 58, № 2. — С. 179–187.
14. **Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е., Кузьменков Е. А.** Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов // *ПМТФ.* — 1987. — № 1. — С. 134–146.
15. **Электронный ресурс** — база ударно-волновых данных. — <http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>.
16. **Грунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Симаков Г. В.** Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. — 2-е изд. — Саров: РФЯЦ ВНИИЭФ, 2006.
17. **Gschneidner K. A.** Physical properties and interrelationships of metallic and semimetallic elements // *Solid State Phys.* — 1964. — V. 16. — P. 275–426.
18. **Holzappel W. V.** Physics of solids under strong compression // *Rep. Prog. Phys.* — 1996. — V. 59. — P. 29–90.
19. **Гилев С. Д.** Малопараметрическое уравнение состояния меди // *Физика горения и взрыва.* — 2018. — Т. 54, № 4. — С. 107–122. — DOI: 10.15372/FGV20180412.
20. **Молодец А. М.** Функция Грюнайзена и нулевая изотерма трех металлов до давлений 10 ТПа // *ЖЭТФ.* — 1995. — Т. 107, вып. 3. — С. 824–831.
21. **Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е.** Уравнения состояния сжатых и нагретых металлов // *Теплофизика высоких температур.* — 1989. — Т. 27, № 1. — С. 42–51.
22. **Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В.** Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. — М., 1975. — (Препр. / АН СССР. Ин-т прикл. математики; № 35).
23. **Perrot F.** Zero-temperature equation of state of metals in the statistical model with density gradient correction // *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* — 1979. — V. 98, N 3. — P. 555.
24. **Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б.** Модифицированная модель Хартри — Фока — Слэтера и ее применение для получения уравнений состояния вещества в области

- высоких температур // Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества / под ред. А. А. Самарского, Н. Н. Калиткина. — М.: Наука, 1989.
25. **Lomonosov I. V.** Multi-phase equation of state for aluminum // *Laser and Particle Beams*. — 2007. — V. 25. — P. 567–584.
26. **Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А.** Полуэмпирическое уравнение состояния металлов. Уравнение состояния алюминия // *Физика горения и взрыва*. — 2008. — Т. 44, № 2. — С. 61–75.
27. **Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Каякин А. А., Куделькин В. Г.** Модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Уравнения состояния Ta, W, Al, Be // *Физика горения и взрыва*. — 2013. — Т. 49, № 1. — С. 106–120.
28. **Greene R. G., Luo H., Ruoff A. L.** Al as simple solid: high pressure study to 220 GPa (2.2 Mbar) // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — V. 73. — P. 2075–2078.
29. **Dewaele A., Loubeyre P., Mezouar M.** Equations of state of six metals above 94 GPa // *Phys. Rev. B*. — 2004. — V. 70. — 094112.
30. **Akahama Y., Nishimura M., Kinoshita K., Kawamura H., Ohishi Y.** Evidence of a fcc-hcp transition in aluminum at multimegabar pressure // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — V. 96. — 045505.
31. **Nellis W. J., Moriarty J. A., Mitchell A. C. et al.** Metals physics at ultrahigh pressure: Aluminum, Copper, and lead as prototypes // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — V. 60. — P. 1414–1417.
32. **Neal T.** Dynamic determinations of the Grüneisen coefficient in aluminum and aluminum alloys for densities up to 6 Mg/m³ // *Phys. Rev. B*. — 1976. — V. 14. — P. 5172–5181.
33. **Nellis W. J., Mitchell A. C., Young D. A.** Equation-of-state measurements for aluminum, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar) // *J. Appl. Phys.* — 2003. — V. 93, N 1. — P. 304–310.
34. **Knudson M. D., Desjarlais M. P., Pribram-Jones A.** Adiabatic release measurements in aluminum between 400 and 1200 GPa: Characterization of aluminum as a shock standard in the multimegabar regime // *Phys. Rev. B*. — 2015. — V. 91. — 224105.

Поступила в редакцию 27.04.2021.

После доработки 04.06.2021.

Принята к публикации 09.06.2021.
