

УДК 532.593

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ НЕОНА С УЧЕТОМ ИСПАРЕНИЯ И ИОНИЗАЦИИ

А. Б. Медведев

РФЯЦ, ВНИИ экспериментальной физики, 607188 Саров, postmaster@ifv.vniief.ru

Построено широкодиапазонное полуэмпирическое уравнение состояния жидкого и газообразного неона с учетом испарения и термической ионизации на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса для смесевых веществ. Дано описание модели и использованных упрощений. Приведены значения определяющих параметров. Представлено сравнение результатов модельных расчетов с экспериментальными данными до давления $\approx 1\,000$ ГПа и результатами расчетов по другим моделям, в том числе при давлении $> 1\,000$ ГПа. В пределе низкой плотности модель переходит в уравнение состояния смеси идеальных газов атомов, ионов всех кратностей и электронов с концентрацией, определяемой уравнениями Саха.

Ключевые слова: неон, жидкость, газ, уравнение состояния, модель Ван-дер-Ваальса, плотность, давление, температура, изотерма, ударная адиабата, испарение, ионизация.

DOI 10.15372/FGV2023.9412

EDN FPXZFD

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к уравнению состояния (УРС) неона связан с его широкой распространенностью в природе (пятое место после Н, Не, О и С), возможным присутствием в планетах-гигантах [1] и различными применениями в технике.

Для описания термодинамических свойств неона используются разнообразные УРС [2–9]. Они отличаются областью применимости, степенью сложности, точностью описания эксперимента, количеством свободных (подбираемых по эксперименту) констант, способностью воспроизведения предельной (идеальный газ) ситуации и др. Достижение широкодиапазонности УРС (изменение плотности и температуры на несколько порядков) в рамках единой модели представляет сложную задачу. Поэтому в некоторых случаях широкодиапазонность реализуется путем формальной интерполяции («сшивки») между отдельными локальными УРС, применимыми в сравнительно узкой области состояний. Для Ne таким является табличное УРС SESAME 5410.

Наиболее широкодиапазонным единым (без привлечения формальных интерполяций) среди названных является УРС [3]. Оно применимо как при высокой плотности $\rho (\geq 1.224 \text{ г/см}^3$ — плотность жидкости при температуре $T = 26 \text{ К}$ и давлении $P \approx 0 \text{ ГПа}$), так и при низкой плотности, включая область испарения. При высоких температурах, где существенна термическая ионизация (термическое возбуждение электронов), в УРС [3] используется модель Томаса — Ферми (ТФ). Кроме жидкого и газообразного состояний, в этом УРС учитывается также твердая фаза Ne. В целом данное УРС согласуется с экспериментом, хотя в отдельных областях по точности оно уступает относительно локальным УРС, например УРС [4] при сравнительно низких значениях P , T . УРС [3] построено около 40 лет назад. Некоторые полученные за это время экспериментальные данные требуют его корректировки.

В настоящей работе построено широкодиапазонное полуэмпирическое УРС Ne с учетом испарения и термической ионизации, относящееся к разряду УРС [3]. Оно имеет несколько различий с последним. В частности, высокотемпературная ионизация здесь описывается моделью типа Саха, которая при малой плотности показывает резкое изменение термодинамических величин в отличие от использованной в [3] плавной модели ТФ.

В разработанном УРС Ne твердая фаза, занимающая относительно небольшое место на фазовой диаграмме, не учитывается. В области ее существования формально используется УРС жидкости. Это не приводит к большим ошибкам, так как изменение плотности при плавлении обычно сравнительно невелико (несколько процентов).

УРС Ne строилось на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса (модель мВдВ, «м» — модификация ВдВ), в общем виде представленной в [10, 11]. При применении модели к Ne применяются описанные далее упрощения. В аналогичном упрощенном виде модель мВдВ применялась ранее для построения широкодиапазонных УРС металлов с учетом испарения и многократной ионизации [12–14] и УРС Ar с учетом испарения и однократной ионизации [10]. В близком варианте, с дополнительным учетом диссоциации, упрощенная модель мВдВ применялась для описания диоксида кремния [11].

Результаты расчетов по разработанному УРС Ne сопоставлены с экспериментальными данными по свойствам Ne при относительно небольших значениях $P \approx 1 \div 1000$ МПа (изотермы $T \approx 10 \div 1000$ К, скорость звука, теплоемкости), изотермическому сжатию при $T = 300$ К до высоких $P \approx 100$ ГПа, ударному сжатию до $P \approx 1000$ ГПа, $T \approx 10^5$ К и др. Также выполнено их сравнение с результатами расчетов по другим УРС.

МОДЕЛЬНОЕ УРС мВдВ

Исходной для модели мВдВ является модель ВдВ, представляющая собой модификацию УРС идеального газа (ИГ). Модель ВдВ расширяет применимость УРС ИГ (малая плотность) в область жидкости (большая плотность) путем учета межчастичного притяжения и собственного объема частиц (посредством коволюма $V_C = b = \text{const}$). Последний фактор увеличивает частоту столкновений частиц по сравнению со случаем ИГ, что вызывает повышение кинетического давления P^{rep} в плотном газе (жидкости) по сравнению с низкоплотным идеальным. Модель ВдВ из-за постоянства V_C неприменима в области повышенной плотности жидкости (при объеме $V \leq b$). Модель мВдВ направлена на расширение применимости модели ВдВ в эту область состояний.

Для простого вещества (здесь — атомарный Ne) термическое (P, V, T -связь) модельное УРС мВдВ определяется в следующей параметрической (с использованием переменной P^{rep}) форме:

$$P = P^{rep} + P^{att}(V, T), \quad (1)$$

$$V = V_C(P^{rep}) + \frac{N_0 k T}{P^{rep}}, \quad (2)$$

где N_0 — число частиц, содержащихся в объеме V ; k — постоянная Больцмана. Первое слагаемое в (1) представляет собой «давление отталкивания» P^{rep} (≥ 0), связанное, как и в ИГ, с поступательным (тепловым) движением частиц. Оно является аналогом кинетического давления P_{hs}^{rep} в системе, состоящей из твердых шариков диаметром d . Второе слагаемое в (1) — «давление притяжения» P^{att} (≤ 0), обусловленное притяжением частиц. В УРС ВдВ $P^{att} = -a/V^2$ ($a = \text{const} > 0$). Далее используется аналогичная зависимость с эмпирической характеристикой $a = a(T) > 0$ (убывающая функция T , см. второй сомножитель в (29)). В формуле (2) $V_C(P^{rep})$ — коволюм, который в рассматриваемой модели мВдВ по предположению является монотонно убывающей функцией давления P^{rep}

(изменяется в диапазоне от 0 до $+\infty$). Введение этой зависимости аналогично введению в модели твердых шариков зависимости их диаметра d от давления P_{hs}^{rep} (оно качественно подобно давлению P^{rep} в модели ВдВ). Функция $V_C(P^{rep})$ — эмпирическая. Можно отметить, что в [15] для низкоплотной ВдВ-жидкости вычислено давление, испытываемое частицами в виде твердых шариков в результате столкновений. Оно равно P^{rep} . С учетом этого представляется естественным использование в УРС ВдВ зависимости $V_C(P^{rep})$, что реализовано в УРС мВдВ.

Наиболее удобными переменными УРС (1), (2) являются P^{rep} , T . Если они заданы, то по ним сначала из (2) находится V , после чего из (1) — P . Таким образом определяется P , V , T -связь (при $N_0 = \text{const}$, что эквивалентно постоянству массы вещества).

В случае $V_C(P^{rep}) = b = \text{const}$ из (2) следует $P^{rep} = N_0 k T / (V - b)$. Подстановка этого выражения в (1) при зависимости $P^{att} = -a/V^2$ ($a = \text{const}$) дает исходное УРС ВдВ

$$P = \frac{N_0 k T}{V - b} - \frac{a}{V^2}. \quad (3)$$

В пределе $V \rightarrow \infty$ ($T = \text{const}$) формула (3) переходит в уравнение ИГ

$$P = \frac{N_0 k T}{V}. \quad (4)$$

При этом $P \rightarrow P^{rep} \rightarrow 0$. Уравнение (4) в пределе $P^{rep} \rightarrow 0$ ($T = \text{const}$) получается также из УРС мВдВ (1), (2). В этом предельном случае соотношение (2) принимает вид $V = N_0 k T / P^{rep}$ (предполагается, что при $P^{rep} \rightarrow 0$ в (2) первое слагаемое $V_C(P^{rep})$ возрастает не быстрее, чем второе слагаемое, пропорциональное $1/P^{rep}$ при $T = \text{const}$). При этом из (1) следует $P \rightarrow P^{rep}$ (при условии, что в (1) притяжение имеет вид $P^{att} = -a(T)/V^2$ или подобно этой функции). В итоге следующее из УРС (1), (2) предельное уравнение принимает вид (4).

В модели ВдВ (3), как и в случае ИГ (4), поступательное движение частиц происходит со средней тепловой скоростью $v \sim (kT/m)^{1/2}$ (m — масса частицы), но центру масс частиц доступен не весь объем V , а только свободный объем $V - b$. Вследствие этого реализуемое при данном движении давление P^{rep} , определяемое первым слагаемым в (3), больше идеально-газового (4). Притяжение снижает это давление на величину a/V^2 . То же самое имеет место в модели мВдВ, но свободный объем равен $V - V_C(P^{rep})$.

Как и модель ВдВ (3), модель мВдВ (1), (2) отражает испарение жидкости благодаря немонотонному поведению докритических изотерм.

Согласно (2) при $T = 0$ выполняется равенство $V = V_C(P^{rep})$. Отсюда следует, что при $T = 0$ давление $P^{rep} = P^{rep}(V_C) \equiv P^{rep}(V)$, где $P^{rep}(V_C)$ — функция, обратная исходной функции $V_C(P^{rep})$. Использование последнего соотношения в (1) дает уравнение для холодного ($T = 0$) давления P_{cold} :

$$P_{cold}(V) = P^{rep}(V) + P^{att}(V, T = 0). \quad (5)$$

В модели ВдВ (3) при $T = 0$ аналогом (5) являются соотношения $V = b$, $P_{cold} = P^{rep} - a/b^2$, где P^{rep} изменяется от 0 до $+\infty$. Они не отражают сжимаемость жидкости в области сжатия при $V < b$. Соотношение (5) позволяет отразить это при соответствующем выборе эмпирических зависимостей $P^{att}(V, T)$ и $V_C(P^{rep})$ (или обратной для нее зависимости $P^{rep}(V_C)$) в (1), (2). Например, если использовать выражения $P^{att} = -A(b/V)^2$, $V_C = b/(P^{rep}/A)^{1/n}$ ($A = a/b^2$, $n > 2$ — константы; a , b — константы УРС ВдВ; $P^{rep} = A(b/V_C)^n$), то (5) запишется в виде $P_{cold} = A((b/V)^n - (b/V)^2)$. Эта функция обращается в нуль при $V = b$, показывая конечную скорость звука в этом состоянии. Таким образом, модель мВдВ, в отличие от ВдВ, применима также в области низкотемпературного сжатия жидкости $V < b$.

Обобщение модельного термического УРС мВдВ для простого вещества (1), (2) на случай смеси, состоящей из атомов ($i = 0$), ионов ($i \geq 1$) и ионизованных (свободных) электронов (e), имеет вид [10, 11]

$$P = P^{rep} + P^{att}(V, T, \{N\}), \quad (6)$$

$$V = V_C(P^{rep}, \{N\}) + \frac{NkT}{P^{rep}}. \quad (7)$$

Здесь $\{N\}$ — состав смеси, определяемый значениями N_i и N_e (число частиц в объеме V);

$$N = \sum_{i=0}^z N_i + N_e \quad (8)$$

— полное число частиц, z — максимальная кратность ионизации учитываемого иона.

В модели (6), (7), как и в модели (1), (2), поступательное движение рассматриваемых частиц в свободном объеме $V - V_C$ описывается классически. Вырождение ионизованных электронов отражается коволюмом [16, 17].

В отсутствие ионизации, т. е. при $N_0 = \text{const}$ и $N_e = 0$, УРС (6), (7) переходит в УРС (1), (2) и обладает свойствами последнего (преобразование в УРС ВдВ (3) при $V_C(P^{rep}) = b = \text{const}$, учет испарения, переход в УРС ИГ (4) при низкой плотности).

В пределе $V \rightarrow \infty$ ($T = \text{const}$) из (7) следует $V = NkT/P^{rep}$, $P^{rep} \rightarrow 0$. Абсолютная величина второго слагаемого в (6) P^{att} предполагается убывающей до нуля при $V \rightarrow \infty$ функцией V (типа функции $1/V^2$). То есть в рассматриваемом пределе согласно (6) $P = P^{rep}$. Поэтому предельное выражение для УРС (6), (7) имеет вид УРС смеси идеальных газов атомов, ионов и электронов $V = NkT/P$.

При $T = 0$ согласно (6), (7)

$$P_{cold} = P^{rep} + P^{att}(V, T = 0, \{N\}_{T=0}), \quad (9)$$

$$V = V_C(P^{rep}, \{N\}_{T=0}). \quad (10)$$

Эти соотношения определяют холодное давление (аналог (5))

$$P_{cold} = P^{rep}(V, \{N\}_{T=0}) + P^{att}(V, T = 0, \{N\}_{T=0}). \quad (11)$$

Отвечающее модели мВдВ выражение для свободной энергии F рассматриваемой смеси дается, совместно с (7), выражением [10, 11]

$$\begin{aligned} F = E^{rep}(P^{rep}, \{N\}) + E^{att}(V, T, \{N\}) - kT \sum_{i=0}^z N_i \ln \left(\frac{eNT^{5/2}\sigma_i(T)r_i}{N_i P^{rep}} \right) - \\ - kTN_e \ln \left(\frac{eNT^{5/2}2r_e}{N_e P^{rep}} \right) + \sum_{i=0}^z N_i \varepsilon_{0,i} + N_e \varepsilon_{0,e}, \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$E^{rep} = - \int_0^{P^{rep}} P^{rep} \left(\frac{\partial V_C(P^{rep}, \{N\})}{\partial P^{rep}} \right) dP^{rep}, \quad (13)$$

$$E^{att} = - \int_{\infty}^V P^{att}(V, T, \{N\}) dV. \quad (14)$$

Здесь под знаком натурального логарифма $e = 2.718 \dots$; $r_j = k^{5/2}(m_j/(2\pi\hbar^2))^{3/2}$ ($j = i, e$; m_j — масса j -й частицы; $\hbar$ — постоянная Планка); $\varepsilon_{0,i}$, $\varepsilon_{0,e}$ — энергия частиц в разреженном ($V \rightarrow \infty$) состоянии вещества при $T = 0$; $\sigma_i(T)$ — внутренняя статистическая сумма атомов и ионов с отсчетом энергии относительно значения $\varepsilon_{0,i}$ ($\sigma_e = 2$); интеграл (13) (после того, как входящая в него частная производная вычислена) берется при $\{N\} = \text{const}$, интеграл (14) определяется при $T = \text{const}$, $\{N\} = \text{const}$.

В формулах, представленных в [10, 11], в соотношениях (12), (7) учитывается также зависимость V_C от T (кроме P^{rep} и $\{N\}$). Здесь для Ne, как и в приложении модели мВдВ к другим веществам [10–14], она не рассматривается.

Вычисленное с помощью (12), (7) выражение для давления $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,\{N\}}$ совпадает с (6).

Общая модель мВдВ, определяемая соотношениями (12), (7), конкретизируется функциями $V_C(P^{rep}, \{N\})$, $P^{att}(V, T, \{N\})$, $\sigma_i(T)$ и параметрами $\varepsilon_{0,i}$, $\varepsilon_{0,e}$. Если они определены, то расчеты наиболее просто проводятся следующим образом. Задаются величины P^{rep} , T , $\{N\}$. По ним из (7) находится V , после чего из (12) — F , из (6) — P . Исключение из этой процедуры P^{rep} позволяет найти функцию F в собственных для нее переменных V , T , $\{N\}$.

В предельном случае $V \rightarrow \infty$ при $T = \text{const}$ (тогда $P^{rep} \rightarrow P \rightarrow 0$, $P = NkT/V$) формула (12) переходит в выражение для F смеси идеальных газов атомов, ионов и электронов, определяемое статистической термодинамикой (четыре последних слагаемых в (12) с учетом в двух первых из них соотношения $P^{rep} = P = NkT/V$). Из условия этого перехода выбраны пределы интегрирования в (13), (14). В случае независимости V_C от P^{rep} первое слагаемое в (12), определяемое формулой (13), равно нулю и выражение (12) переходит в соотношение для F модели ВдВ рассматриваемой смеси.

Выражения для энтропии $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,\{N\}}$, внутренней энергии $E = F + TS$ и химических потенциалов $\mu_j = \left(\frac{\partial F}{\partial N_j}\right)_{V,T}$ ($j = i, e$), следующие из (12), (7), имеют вид:

$$S = \int_{\infty}^V \left(\frac{\partial P^{att}(V, T, \{N\})}{\partial T} \right) dV + k \sum_{i=0}^z N_i \ln \left(\frac{NT^{5/2} \sigma_i(T) r_i}{N_i P^{rep}} \right) + k \sum_{i=1}^z N_i \left(\frac{d \ln T^{5/2} \sigma_i(T) r_i}{d \ln T} \right) + k N_e \ln \left(\frac{NT^{5/2} 2 r_e}{N_e P^{rep}} \right) + 2.5 k N_e, \quad (15)$$

$$E = E^{rep}(P^{rep}, \{N\}) + E^{att}(V, T, \{N\}) + T \int_{\infty}^V \left(\frac{\partial P^{att}(V, T, \{N\})}{\partial T} \right) dV + + 3/2 NkT + kT \sum_{i=0}^z N_i \frac{d \ln \sigma_i(T) r_i}{d \ln T} + \sum_{i=0}^z N_i \varepsilon_{0,i} + N_e \varepsilon_{0,e}, \quad (16)$$

$$\mu_j = \varphi_j(P^{rep}, \{N\}) - \xi_i(V, T, \{N\}) - kT \ln \left(\frac{N}{N_j} \right) + kT \ln(P^{rep}) + \psi_j(T) + \varepsilon_{0,j}, \quad (17)$$

где

$$\varphi_j = \int_0^{P^{rep}} \left(\frac{\partial V_C(P^{rep}, \{N\})}{\partial N_j} \right) dP^{rep}, \quad (18)$$

$$\xi_j = \int_{\infty}^V \left(\frac{\partial P^{att}(V, T, \{N\})}{\partial N_j} \right) dV, \quad (19)$$

$$\psi_j = -kT \ln(T^{5/2} \sigma_j(T) r_j), \quad (20)$$

E^{rep} — (13), E^{att} — (14). Интегралы, входящие в формулы (15)–(19), берутся (после того, как входящие в них частные производные вычислены) при постоянных значениях соответствующих аргументов подынтегральных функций, за исключением тех, по которым проводится интегрирование.

По заданным переменным P^{rep} , T , $\{N\}$ значения S (15), E (16), μ_j (17) находятся с использованием определяемого по этим переменным значения V (7). Энергия E в собственных переменных V , S , $\{N\}$ рассчитывается с применением значений V (7) и S (15). Величина μ_j в переменных P , T , $\{N\}$ находится с помощью рассчитываемого по (6) значения P .

В состоянии термодинамического равновесия значения N_i , N_e определяются уравнениями

$$\mu_i = \mu_{i+1} + \mu_e, \quad (21)$$

в которых учитываются уравнение (8) и уравнения материального баланса (сохранения суммарной массы атомов и ионов) и электронейтральности

$$\sum_{i=0}^z N_i = \bar{N}_0, \quad (22)$$

$$N_e = \sum_{i=0}^z i N_i, \quad (23)$$

где $\bar{N}_0 = \text{const}$ — исходное (до ионизации) число атомов в фиксированной массе вещества.

В настоящей работе УРС Не строилось на основе упрощенного вида общей модели мВдВ (12), (7). При этом применялись, как и в [10–14] для других веществ, следующие упрощающие предположения.

Используется простейшее приближение $\sigma_i(T) = g_i = \text{const}$ (g_i — статистический вес основного электронного состояния ионов).

Полагается, что функции $P^{att}(V, T, \{N\})$ и $V_C(P^{rep}, \{N\})$ не зависят от $\{N\}$. В этом случае, поскольку при фиксированном значении T давление P и его составляющие P^{att} и P^{rep} зависят от плотности массы вещества, эти функции определяются выражениями

$$P^{att} = P^{att}(V/M, T) = P^{att}(v, T), \quad (24)$$

$$V_C/M = v_C(P^{rep}), \quad (25)$$

где $M = m \sum_{i=0}^z N_i$ — масса вещества в объеме V , m — масса атома (массой электронов и различием масс атома и ионов пренебрегается); v , v_C — удельные (единицы массы) объем и коволюм вещества ($1/v = \rho$ — плотность массы вещества, $1/v_C$ — плотность массы вещества при $T = 0$).

Применение (24), (25) в (11) дает

$$P_{cold}(v) = P^{rep}(v) + P^{att}(v, T = 0), \quad (26)$$

где согласно (10) $v = v_C$.

Использование (24), (25) в (18), (19) приводит к равенству входящих в (17) величин φ_i , ξ_i для всех i -х тяжелых частиц и к условиям $\varphi_e = 0$, $\xi_e = 0$. С учетом этого подстановка (17) в (21) дает уравнения

$$\frac{NN_i}{N_e N_{i+1}} = \frac{P^{rep} \exp(I_i/kT) \sigma_i(T)}{T^{5/2} r_e 2\sigma_{i+1}(T)}, \quad (27)$$

где

$$I_i = \varepsilon_{0,i+1} + \varepsilon_{0,e} - \varepsilon_{0,i} \quad (28)$$

— потенциал ионизации атома и i -го иона. При записи (27) учтено, что практически точно $r_{i+1} = r_i$ (так как $m_{i+1} = m_i = m$).

В результате численного решения уравнений (27) совместно с (8), (22), (23) определяется равновесный состав $\{N\}$, отвечающий определенным переменным P^{rep} , T . После этого по значениям P^{rep} , T , $\{N\}$ описанным выше способом (с вычислением V из (7)) находятся равновесные значения F (12), P (6), S (15), E (16).

Уравнения (27) аналогичны уравнениям ионизационного равновесия Саха в переменных P , T [18]. Они переходят в них при $v \rightarrow \infty$, $T = \text{const}$ (тогда в (27) $P^{rep} \rightarrow P$).

В уравнениях (27), являющихся следствием упрощений (24), (25), учитывается только термическая ионизация, но не ионизация «давлением» при высокой плотности и низкой температуре (модельное значение $N_e = 0$ при $T = 0$ и различных P^{rep} и P). Свойства вещества в этой низкотемпературной области состояний описываются эмпирически с помощью уравнения для «холодной» кривой (26). Таким образом, УРС, основанное на упрощенной модели мВдВ, отражает два предельных случая (низкая плотность — модель Саха, высокая плотность при $T = 0$ К — уравнение (26)), осуществляя между ними сравнительно простую интерполяцию.

Далее положено, что в (16) (и других формулах) значение для атомов $\varepsilon_{0,0} = 0$, что отвечает выбору начала отсчета энергии $E = 0$ в состоянии идеального газа атомов при $T = 0$, $\rho = 0$. При этом два последних слагаемых в (16) с учетом уравнений (22),

(23), (28) можно представить формулой $\sum_{i=1}^z N_i \sum_{j=0}^{i-1} I_j$ (I_0 — потенциал ионизации атома).

Описанная модель мВдВ с учетом ионизации (полная и упрощенная) качественно подобна моделям [19–21], отражающим неточность атомов и ионов, которые моделируются твердыми шариками диаметра d_i (модели использовались для металлов, УРС Ne на их основе не строилось). Учет неточности, вне зависимости от способа рассмотрения других факторов (использования [20, 21] или нет [19] приближения $\sigma_i(T) = g_i = \text{const}$, учета [19, 20] или нет [21] притяжения $P^{att}(V, T, \{N\}$ и др.), является определяющим при расширении применимости модели Саха в область высокой плотности (порядка нормальной и выше). В [19] считалось $d_i = d_0 = \text{const}$. В этом случае при $T = 0$ (или $T \approx 0$ К) увеличение P (или увеличение кинетического давления в смеси шариков P_{hs}^{rep}) может уменьшить объем V смеси только до объема $V_{hs}(P, \{N\}_{T=0}) = \text{const}$, соответствующего плотной упаковке шариков. Это отвечает условию $V_C(P^{rep}, \{N\}_{T=0}) = \text{const}$ в моделях смеси мВдВ и ВдВ. При этом во всех случаях (НС, мВдВ и ВдВ) отражается (уравнениями типа (27)) только термическая ионизация. В моделях [20, 21] диаметры d_i полагаются уменьшающимися с ростом i . Вследствие этого различному составу $\{N\}_{T=0}$ отвечают различные объемы плотноупакованных шариков $V_{hs}(P, \{N\})$ (например, $V_{hs} = V_{hs,0}$ для атомов, $V_{hs} = V_{hs,1} < V_{hs,0}$ при полной первой ионизации и т. д.) В этой модели уравнения равновесия (21) при $T = 0$ (или $T \approx 0$ К) показывают многократное ступенчатое изменение $\{N\}_{T=0}$ (ступенчатое увеличение N_e , ионизация давлением) с увеличением P

(и P_{hs}^{rep}). При этом холодное сжатие приводит к многократному скачкообразному уменьшению объема (от $V_{hs,0}$ до $V_{hs,1}$ и т. д.). Примером является представленная в [21] изотерма $T = 3$ эВ. То же явление ионизации давлением можно отразить в моделях мВдВ и ВдВ, считая коволюм $V_C(P^{rep}, \{N\}_{T=0})$ (10) не зависящим от P^{rep} , но уменьшающимся (аналог уменьшения d_i) с изменением $\{N\}_{T=0}$ (например, $V_C = V_{C,0}$ для атомов, $V_C = V_{C,1} < V_{C,0}$ при полной первой ионизации и т. д.). При этом объем V (и плотность) вдоль холодной кривой, определяемой (11), является скачкообразной функцией P . Такая зависимость не позволяет описать эксперимент по низкотемпературному сжатию, которое в большинстве случаев (жидкие и твердые, без фазовых переходов, металлы, Ne и др.) является плавным. Для описания этого в упрощенной модели мВдВ с зависимостью (25) используется (для Ne и других веществ) плавно убывающая зависимость $V_C(P^{rep})$. При этом уравнения (27) не дают ионизации давлением. Для ее воспроизведения в модели мВдВ требуется использование коволюма $V_C(P^{rep}, \{N\}_{T=0})$, который при $P^{rep} = \text{const}$ уменьшается при изменении $\{N\}_{T=0}$ ($V_C = V_{C,0}(P^{rep})$ для атомов, $V_C = V_{C,1}(P^{rep}) < V_{C,0}(P^{rep})$ при полной первой ионизации и т. д.). Используемый здесь способ, когда вместо многих зависимостей $V_C = V_{C,i}(P^{rep})$ задается лишь одна зависимость $V_C(P^{rep})$ (25), существенно упрощает модель мВдВ и в то же время позволяет приемлемо отразить с помощью (26) данные по сжатию при $T \approx 0$ (см. далее рис. 13, 16).

КОНКРЕТИЗАЦИЯ МОДЕЛИ ДЛЯ НЕОНА

При описании Ne использовались следующие эмпирические зависимости P^{att} (24) и v_C (25).

Притяжение представлялось формулой

$$P^{att} = -A \frac{\gamma \exp(-\lambda T) + 1}{\gamma + 1} \left(\frac{v_{00}}{v} \right)^2 \quad (29)$$

со следующими значениями параметров: $A = 0.180764$ ГПа, $\gamma = 1.8$, $\lambda = 0.015$ К⁻¹, $v_{00} = 0.64683$ см³/г ($P^{att} - [\text{ГПа}]$, $v - [\text{см}^3/\text{г}]$). В случае (29) интеграл (14) вычисляется аналитически.

Коволюм при относительно небольших давлениях $0 < P^{rep} < P_1^{rep}$ ($P_1^{rep} = \text{const}$) определялся функцией

$$v_C = v_{00} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \ln \frac{P^{rep}}{A} \right), \quad (30)$$

где v_{00} , A — те же постоянные, что и в (29); $\alpha = 9.0824$. В интервале $P_1^{rep} < P^{rep} < P_2^{rep}$ ($P_2^{rep} = \text{const}$) он задавался в виде

$$v_C = \frac{A_1}{(P^{rep})^{N_1}} + \frac{B_1}{(P^{rep})^{M_1}}, \quad (31)$$

где A_1 , N_1 , B_1 , $M_1 = \text{const}$. При $P^{rep} > P_2^{rep}$ для него использовалось представление

$$v_C = \frac{A_2}{(P^{rep})^{N_2}} + \frac{B_2}{(P^{rep})^{2/3}} + \frac{C_2}{(P^{rep})^{0.5}}, \quad (32)$$

где A_2 , N_2 , B_2 , $C_2 = \text{const}$. Выражения (30), (31) и (31), (32) «сшивались» между собой по значениям функций и их первых производных при $P^{rep} = P_1^{rep}$ и $P^{rep} = P_2^{rep}$ соответственно. В (31), (32) принято $P_1^{rep} = 27.11463$, $A_1 = -2.0772076$, $N_1 = 0.591435$, $B_1 = 2.3393441$, $M_1 = 0.42000$, $P_2^{rep} = 1.8076419 \cdot 10^4$, $A_2 = -409.407418$, $N_2 = 0.6837452$, $B_2 = 366.800055$, $C_2 = 0.275008877$ (давление P^{rep} в формулах (30)–(32) выражено в ГПа, при этом они

определяют значение v_C в $\text{см}^3/\text{г}$). Функции (30)–(32) позволяют вычислить интеграл (13) аналитически.

Использование (29), (30) в (26) соответствует $P_{\text{cold}} = 0$ при $v = v_{00}$ ($\rho = 1.546 \text{ г/см}^3$). Параметры в (29) подбирались преимущественно исходя из описания свойств Ne в области расширения $v > v_{00}$, параметры в (30)–(32) — на основе описания его характеристик в области сжатия $v < v_{00}$ при низкой температуре. Применение (29) и (32) в (26) дает выражение $P_{\text{cold}}(V) = 1000 (AE/(AW \cdot V))^{5/3}$ ($AE = 10$ — число электронов в атоме, $AW = 20.183$ — атомная масса Ne), определяющее давление вырожденного электронного газа при $T = 0$ [18].

В УРС Ne учитывались все ионы ($z = 10$). Значения I_i и g_i приняты по [22, 23]. Первые равны 21.6, 41.0, 63.5, 97.1, 126.2, 157.9, 207.3, 239.1, 1195.8, 1362.2 эВ, вторые — 1, 6, 9, 4, 9, 6, 1, 2, 1, 2, 1.

Параметры A и α в (29), (30) несколько отличаются от использованных в [8] при построении УРС Ne в форме мВдВ в области относительно низких давлений и температур без учета ионизации. С использованными здесь параметрами чуть лучше описываются данные на линии равновесия жидкость — газ.

Все зависимости $P(\rho)$ вдоль изотерм, отвечающие УРС Ne (и УРС других веществ, построенных на основе упрощенной модели мВдВ), за исключением области испарения, являются монотонными. То есть какие-либо фазовые переходы, за исключением перехода жидкость — газ, в УРС отсутствуют.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ НЕОНА

В рассматриваемых далее на рис. 1–13 и 16 ρ , T , P -условиях ионизация пренебрежимо мала. В этом случае термическое УРС определяется формулами (1), (2), а величины S , E и другие рассчитываются по формулам (15), (16), в которых $N_0 = \text{const}$, $N_e = 0$.

Далее на рис. 1–10 проведены результаты расчетов в сопоставлении с данными NIST [24]. Последние получены путем аппроксимации имеющихся экспериментальных данных многопараметрическим (многие десятки подгоночных параметров) УРС [4] и здесь рассматриваются как экспериментальные.

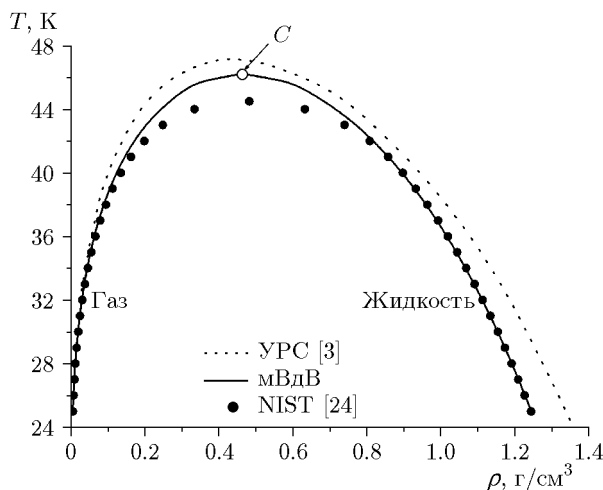


Рис. 1

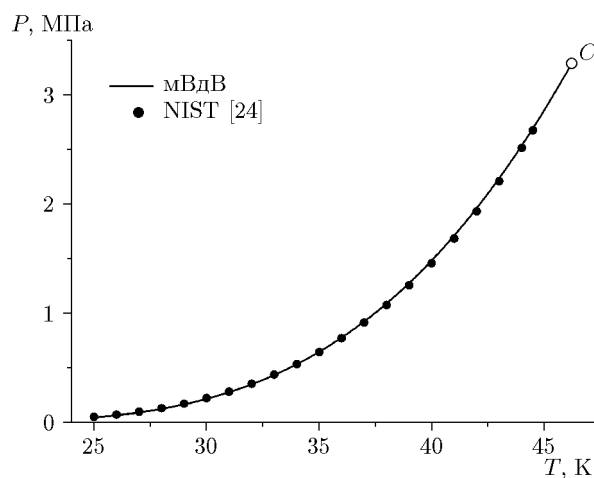


Рис. 2

Рис. 1. Зависимость температуры от плотности на линии равновесия жидкость — газ

Рис. 2. Зависимость давления от температуры на линии равновесия жидкость — газ

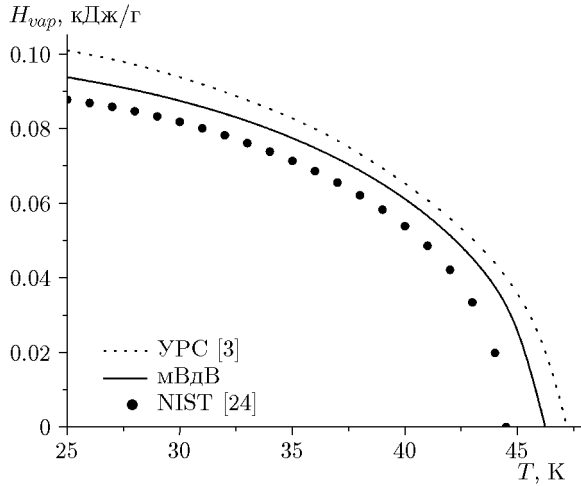


Рис. 3

Рис. 3. Зависимость энтальпии испарения от температуры на линии равновесия жидкость — газ

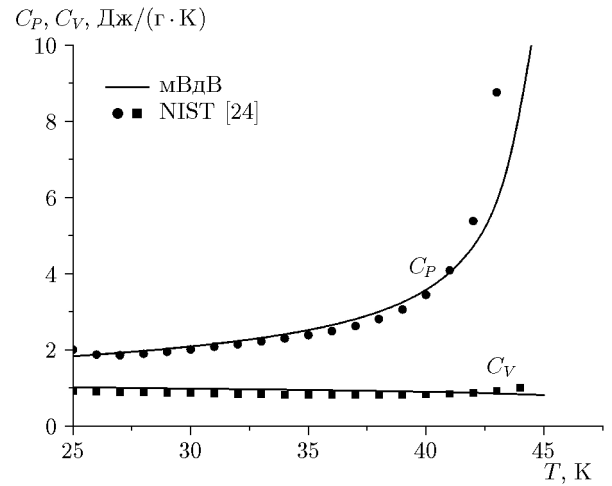


Рис. 4

Рис. 4. Зависимости изобарической и изохорической теплоемкостей от температуры вдоль жидкостной ветви линии равновесия жидкость — газ

На рис. 1 и 2 показаны расчетные зависимости $T(\rho)$ и $P(T)$ вдоль кривой испарения согласно построенному УРС мВдВ. Они определялись с помощью правила площадей Максвелла. Параметры критической точки C на этих линиях находились из условий $\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_T = 0$. В УРС мВдВ они равны $\rho_C = 0.463 \text{ г/см}^3$, $T_C = 46.2 \text{ К}$, $P_C = 3.30 \text{ МПа}$. По [24] $\rho_C = 0.482 \text{ г/см}^3$, $T_C = 44.5 \text{ К}$, $P_C = 2.68 \text{ МПа}$. Как видно из рисунков, на удалении от критического состояния (при $T < 40 \text{ К}$) расчет хорошо воспроизводит эксперимент. На рис. 1 также дана расчетная зависимость $T(\rho)$ по УРС [3]. Она отстоит дальше от эксперимента, чем линия испарения по УРС мВдВ. Согласно УРС [3] $\rho_C = 0.431 \text{ г/см}^3$, $T_C = 47.2 \text{ К}$, $P_C = 3.18 \text{ МПа}$. Данные значения T_C и P_C , как и в УРС мВдВ, больше экспериментальных.

На рис. 3 представлены экспериментальная и расчетные по УРС мВдВ и УРС [3] зависимости энтальпии испарения $H_{vap}(T) = H_{gas}(T) - H_{liq}(T)$ ($H = E + PV$) от температуры. Первое УРС несколько лучше описывает эксперимент, при этом расчет по обоим УРС из-за завышенного в них по сравнению с [24] значения T_C проходит выше эксперимента.

На рис. 4 приведены экспериментальные и расчетные по УРС мВдВ зависимости изобарической $C_P = T\left(\frac{dS}{dT}\right)_P$ и изохорической $C_V = T\left(\frac{dS}{dT}\right)_V$ теплоемкостей от температуры вдоль жидкостной ветви линии испарения. На рис. 5 эти зависимости даны для газовой ветви этой линии. На рис. 6 показана скорость звука $C = \sqrt{\left(\frac{dP}{d\rho}\right)_S}$ вдоль обеих ветвей линии испарения. В целом модель соответствует эксперименту, хотя в некоторых случаях согласия нет. В частности, на рис. 5 для газа значения C_P , C_V при $T \approx 25 \text{ К}$ значительно меньше экспериментальных.

На рис. 7 сопоставлены экспериментальные и расчетные по УРС мВдВ изотермы $T = 25 \div 700 \text{ К}$ до $P = 100 \text{ МПа}$. При $T = 50 \div 100 \text{ К}$ вторые несколько мягче первых (при $P = 100 \text{ МПа}$ — на $\approx 2 \%$ по ρ). В целом соответствие хорошее.

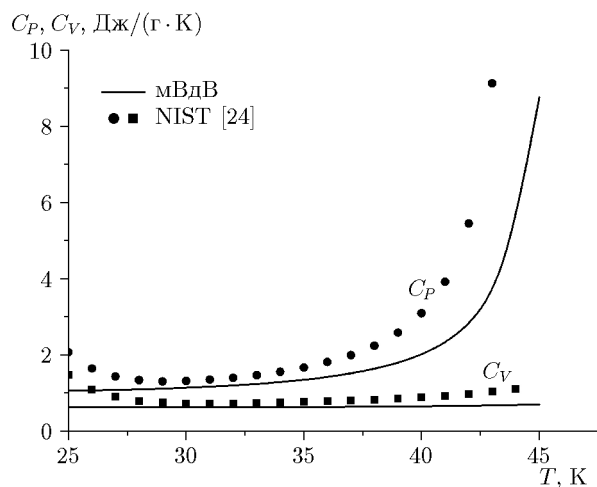


Рис. 5

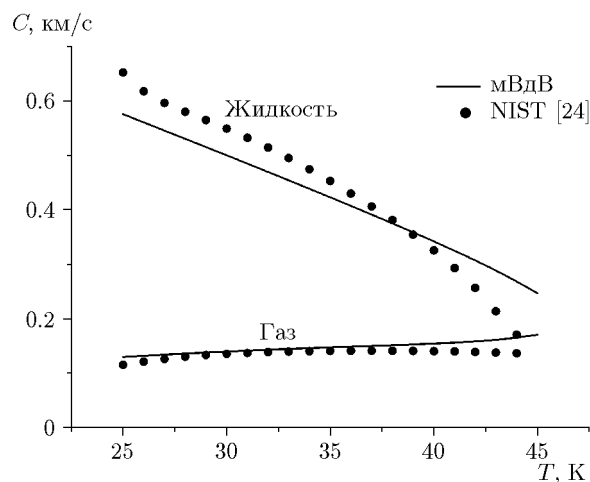


Рис. 6

Рис. 5. Зависимости изобарической и изохорической теплоемкостей от температуры вдоль газовой ветви линии равновесия жидкость — газ

Рис. 6. Зависимости скорости звука от температуры вдоль жидкостной и газовой ветвей линии равновесия жидкость — газ

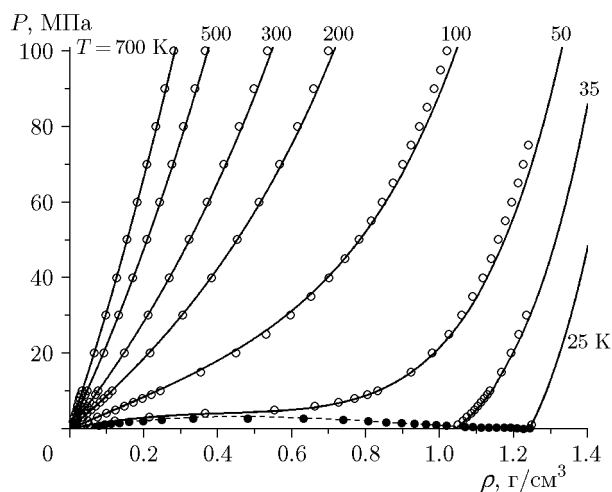


Рис. 7

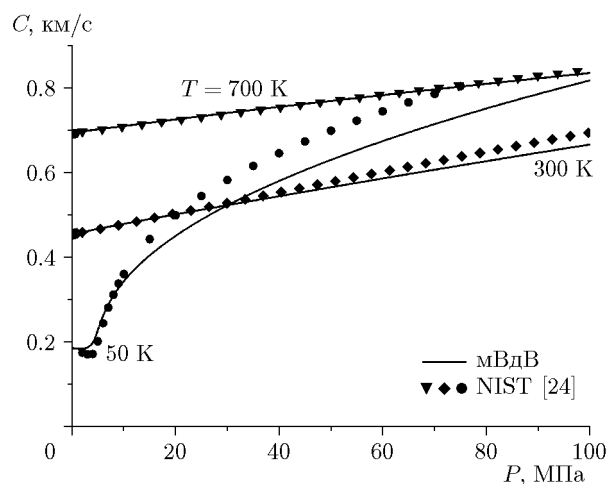


Рис. 8

Рис. 7. Зависимости давления от плотности вдоль изотерм и линии равновесия жидкость — газ:

светлые и темные кружки — изотермы и линия равновесия соответственно NIST [24]; сплошные линии — изотермы, штриховая — линия равновесия УРС мВдВ

Рис. 8. Зависимости скорости звука от давления вдоль изотерм

На рис. 8 дано описание данных по скорости звука вдоль изотерм $T = 50, 300, 700$ К. Оно удовлетворительное, но на изотерме $T = 50$ К в интервале $P \approx 30 \div 70$ МПа расчетная скорость меньше экспериментальной на $\approx 10\%$.

На рис. 9 представлены зависимости C_P, C_V от P вдоль изотермы $T = 50$ К, на рис. 10 — вдоль изотермы $T = 700$ К. В первом случае эксперимент показывает максимум при $P \approx 5$ МПа. В наибольшей степени максимум выражен для C_P . УРС мВдВ

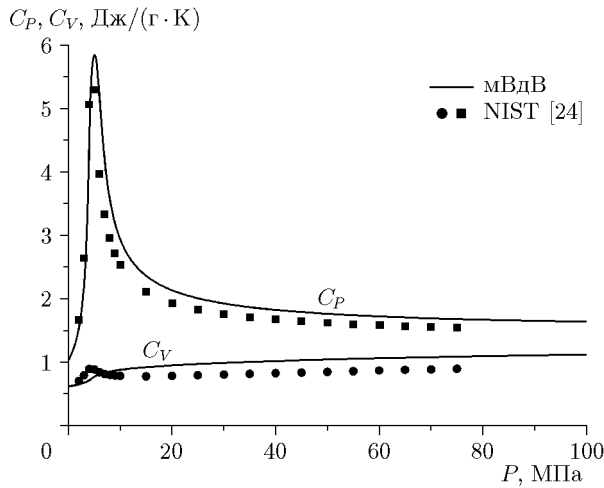


Рис. 9

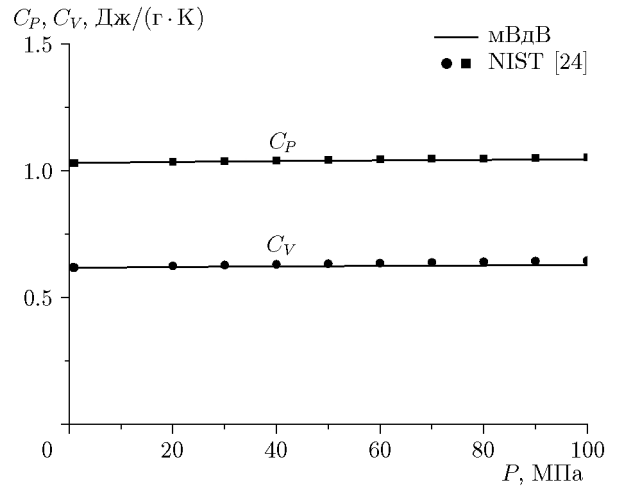


Рис. 10

Рис. 9. Зависимости изобарической и изохорической теплоемкостей от давления вдоль изотермы $T = 50$ К

Рис. 10. Зависимости изобарической и изохорической теплоемкостей от давления вдоль изотермы $T = 700$ К

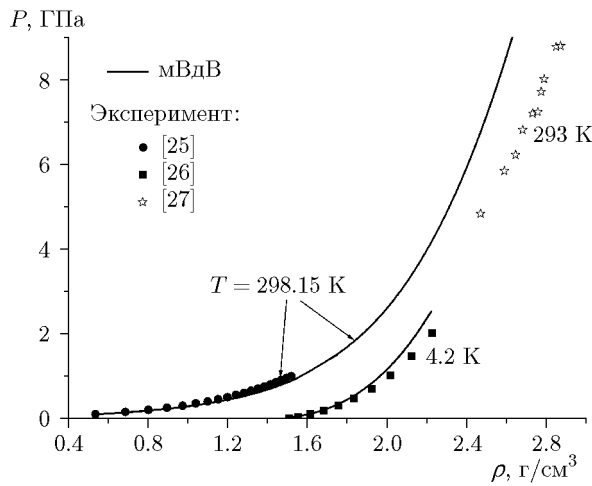


Рис. 11

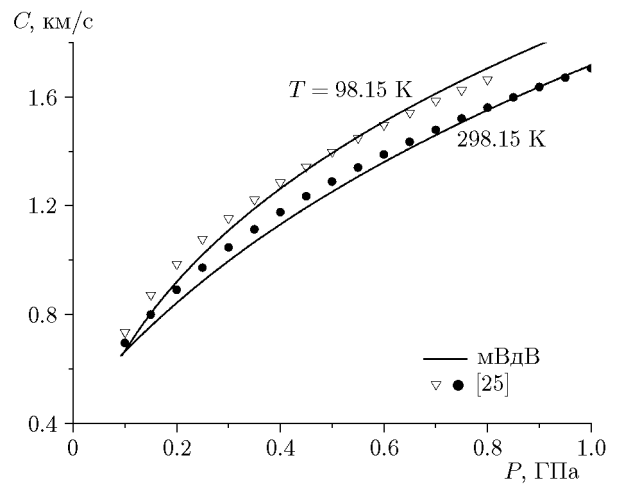


Рис. 12

Рис. 11. Зависимости давления от плотности вдоль изотерм

Рис. 12. Зависимости скорости звука от давления вдоль изотерм

хорошо передает эту особенность. Сравнительно небольшой максимум C_V УРС не отражает. На рис. 10 экспериментальное поведение как C_P , так и C_V хорошо воспроизводится расчетом. В интервале $T = 50 \div 700$ К расчет по отношению к эксперименту занимает промежуточное положение между представленными на рис. 9 для $T = 50$ К и на рис. 10 для $T = 700$ К.

На рис. 11 показаны описанные с помощью УРС мВдВ экспериментальные данные [25] по сжатию при $T = 298.15$ К. На рис. 12 приведено сравнение с данными [25] по скорости звука при $T = 98.15, 298.15$ К. В обоих случаях максимальное давление $P \approx 1$ ГПа, не находится в жидком состоянии. Расчетная зависимость $P(\rho)$ на рис. 11 проходит несколько

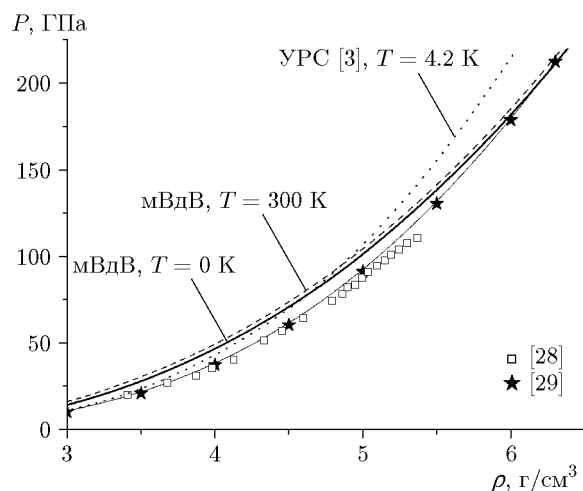


Рис. 13

Рис. 13. Зависимости давления от плотности вдоль изотерм $T = 0, 4.2, 300$ К

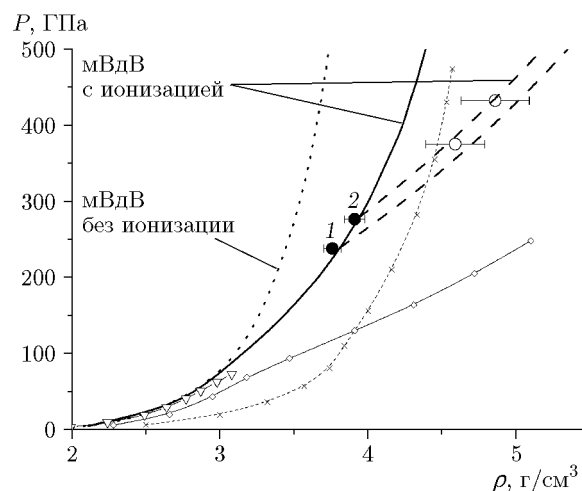


Рис. 14

Рис. 14. Зависимости давления от плотности вдоль ударных адиабат:

эксперимент: темные кружки 1 и 2 — однократное сжатие при $\rho_0 = 1.224$ г/см³ [30]; светлые кружки — двукратное сжатие из состояний 1 и 2 [30]; расчет при однократном ударном сжатии: пунктирная линия — расчет по УРС мВдВ при $\rho_0 = 1.224$ г/см³ без учета ионизации, сплошная линия — расчет по УРС мВдВ при $\rho_0 = 1.224$ г/см³ с учетом ионизации, крестики — УРС SESAME 5410 при $\rho_0 = 1.224$ г/см³, треугольники — УРС [3] при $\rho_0 = 1.248$ г/см³, ромбы — УРС [5] при $\rho_0 = 1.207$ г/см³; штриховые линии — расчетные ударные адиабаты двукратного сжатия из состояний 1 и 2 по УРС мВдВ с учетом ионизации

мягче (при $P = 1$ ГПа — на $\approx 3\%$ по ρ), чем экспериментальная [25]. Расчетные зависимости $C(P)$ до $P \approx 0.5$ ГПа на рис. 12 расположены на $\approx 5\%$ ниже экспериментальных. На рис. 11 также представлены экспериментальные данные по сжатию твердого Ne при $T = 4.2$ К [19] и 293 К [20]. С ними могут быть сопоставлены расчетные изотермы по УРС мВдВ для жидкости, с учетом того, что твердое вещество при $T = \text{const}$, $P = \text{const}$ обычно плотнее жидкого на несколько процентов по ρ . Из рис. 11 видно, что модельная изотерма $T = 4.2$ К близка к эксперименту, а модельная изотерма $T = 293$ К жестче эксперимента на $\approx 8\%$ по ρ . Уменьшение этого значения путем смягчения УРС приводит к ухудшению описания на рис. 11 данных [25] при $T = 298.15$ К для жидкого Ne. УРС [3], учитывающее твердую фазу, хорошо описывает экспериментальные данные на рис. 11 и 12.

В [28] экспериментально определено сжатие твердого Ne при $T = 300$ К до 110 ГПа. В опытах [29] изучалось поведение Ne при различных температурах до 212 ГПа. По этим данным была получена изотерма $T = 0$ К. Она и данные [28] при $T = 300$ К представлены на рис. 13. Там же приведены изотермы $T = 0$ и 300 К согласно УРС мВдВ. Они близки между собой. При $P \leq 100$ ГПа эти зависимости жестче эксперимента [28, 29] на $\approx 5\%$ по ρ . В интервале $P \approx 100 \div 200$ ГПа расхождение расчета с данными [29] при $T = 0$ К составляет $\approx 1\%$. Жесткость модельных изотерм по отношению к данным [28, 29] является естественной, так как плотность жидкости, как правило, меньше плотности твердого вещества. На рис. 13 также представлена изотерма $T = 4.2$ К твердого Ne согласно УРС [3]. При $P > 25$ ГПа она жестче эксперимента [28, 29] (при $P = 200$ ГПа жестче на $\approx 5\%$ по ρ). Это указывает на необходимость смягчения УРС [3] в рассматриваемой на рис. 13 области состояний.

В [30] получены приведенные на рис. 14 (точки 1 и 2) экспериментальные данные по

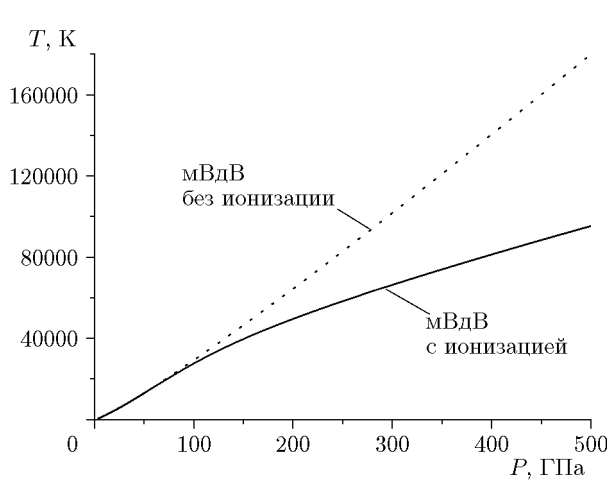


Рис. 15

Рис. 15. Расчетные зависимости температуры от давления вдоль ударной адиабаты однократного сжатия при $\rho_0 = 1.224 \text{ г/см}^3$ по УРС мВдВ без учета ионизации (пунктирная линия) и с ее учетом (сплошная линия)

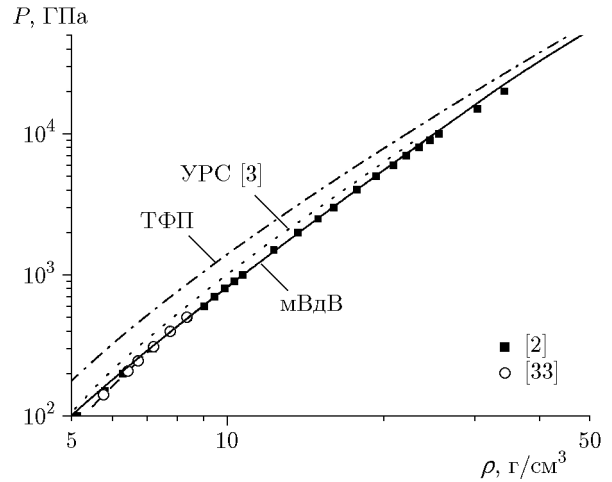


Рис. 16

Рис. 16. Модельные зависимости давления от плотности при $T = 0 \text{ К}$

ударному сжатию исходно жидкого Ne с начальными характеристиками $\rho_0 = 1.224 \text{ г/см}^3$, $P_0 \approx 0$ ($T_0 = 26 \text{ К}$). На рис. 14 представлены также результаты расчетов ударной адиабаты по УРС мВдВ, которая определялась в результате решения уравнения [31]

$$E = E_0 + (P + P_0)(1/\rho_0 - 1/\rho)/2, \quad (33)$$

где E_0 , P_0 , ρ_0 — внутренняя энергия, давление и плотность вещества в начальном состоянии, величины E , P , ρ определяются по УРС. Расчет рассматриваемой ударной адиабаты выполнен в двух вариантах — без учета ионизации (при $N_0 = \text{const}$, $N_e = 0$) и с ее учетом (по (27)). Результаты расчетов представлены на рис. 14. Первая зависимость проходит значительно жестче ударных точек 1 и 2, вторая — практически точно через них. Соответствующие этим двум вариантам значения температуры представлены на рис. 15. Учет ионизации приводит к сильному снижению температуры. В [30] также выполнены измерения двукратной ударной сжимаемости из состояний 1 и 2 на рис. 14, достигнутых в первой волне. Результаты приведены на рис. 14. Там же даны рассчитанные (с применением уравнения (33)) ударные адиабаты по УРС мВдВ с учетом ионизации. Расчетные зависимости хорошо согласуются с рассматриваемыми данными. На рис. 14 также изображены ударные адиабаты, полученные по УРС [3] при $\rho_0 = 1.248 \text{ г/см}^3$ ($T_0 = 24.5 \text{ К}$), по УРС [5] при $\rho_0 = 1.207 \text{ г/см}^3$ ($T_0 = 27.0 \text{ К}$) и по УРС SESAME 5410 при $\rho_0 = 1.224 \text{ г/см}^3$ ($T_0 = 26 \text{ К}$). В первых двух случаях значение ρ_0 немного отличается от $\rho_0 = 1.224 \text{ г/см}^3$. Как видно из рис. 14, расчетные ударные адиабаты УРС [5] и УРС SESAME 5410 значительно расходятся с экспериментом [30]. Ударная зависимость по УРС [3], которая по представленным в [3] расчетным данным может быть построена только до $P = 70 \text{ ГПа}$, близка к этой зависимости по УРС мВдВ.

На рис. 16 показаны кривые холодного сжатия Ne по модели ТФП (ТФ с поправками [32]), по квантово-механической модели [33] (до $P = 500 \text{ ГПа}$), по УРС [2, 3] (полуэмпирические аппроксимации) и по УРС мВдВ. Зависимости [2] и мВдВ согласуются друг с другом. При низком давлении они близки к расчету [33], при высоком — к расчету по модели ТФП. «Холодная» кривая УРС [3] проходит выше них. По-видимому, с учетом

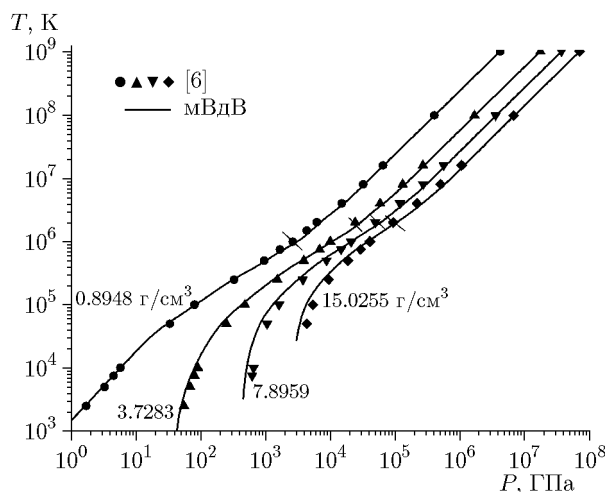


Рис. 17

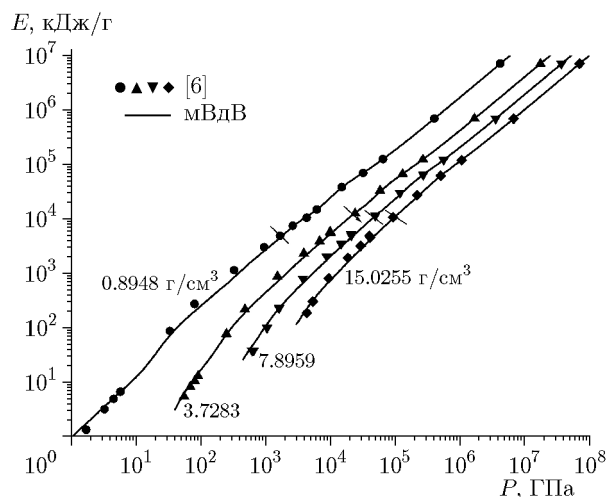


Рис. 18

Рис. 17. Модельные зависимости температуры от давления при различных значениях плотности

Рис. 18. Модельные зависимости энергии от давления при различных значениях плотности

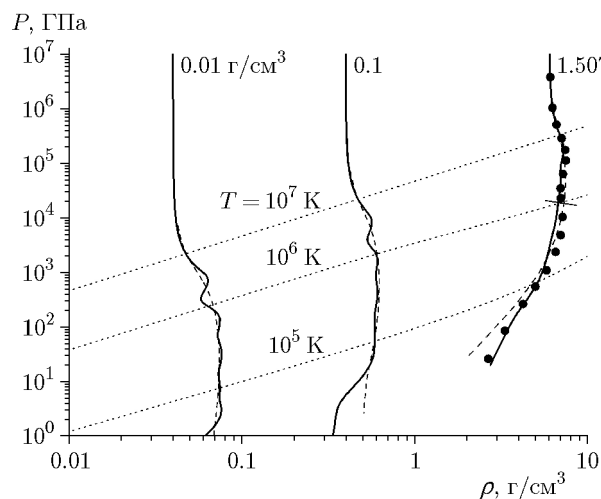


Рис. 19

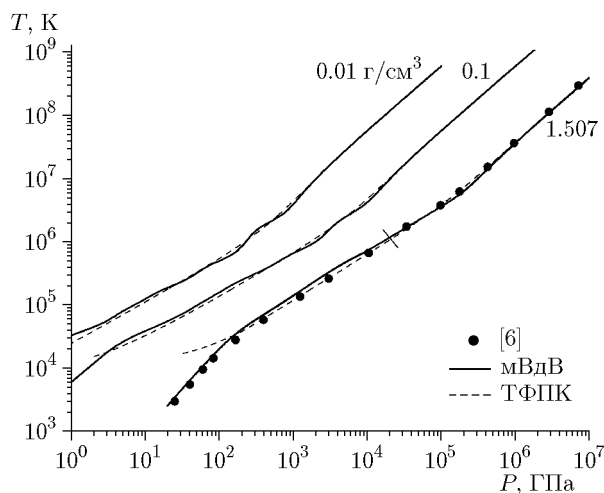


Рис. 20

Рис. 19. Расчетные зависимости давления от плотности вдоль ударных адиабат при различных начальных значениях плотности:

кружки — модель [6], штриховые линии — модель ТФПК, сплошные линии — УРС мВдВ, пунктирные линии — изотермы $T = 10^5$, 10^6 , 10^7 К по УРС мВдВ

Рис. 20. Расчетные зависимости температуры от давления вдоль ударных адиабат при различных начальных значениях плотности

излишне жесткого поведения изотермы $T = 4.2$ К этого УРС по отношению к эксперименту [28, 29] (см. рис. 13), она является жесткой также и при рассматриваемых на рис. 16 более высоких, чем на рис. 13, давлениях.

В [6] выполнены расчеты термодинамических свойств плотного Ne с применением квантово-механических моделей DFT-MD и PIMC. Первая модель в [6] используется при

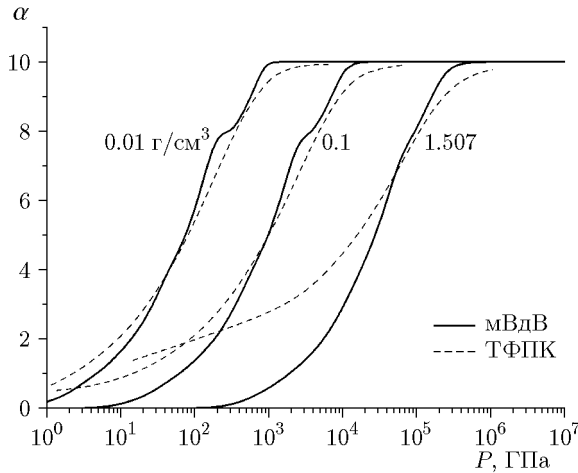


Рис. 21. Расчетные зависимости степени ионизации от давления вдоль ударных адиабат при различных начальных значениях плотности

сравнительно низких значениях P, T , вторая — при высоких. Между ними осуществляется формальная сшивка. В [6] приведены табличные данные относительно зависимостей $T(P)$ и $E(P)$ при значениях плотности 0.8948, 3.7283, 7.8959 и 15.0255 г/см³. Эти данные приведены на рис. 17 и рис. 18 соответственно (энергия отсчитана от энергии свободного атома). Места сшивки моделей DFT-MD и PIMC показаны косыми чертами. На рисунках представлены также зависимости $T(P)$ и $E(P)$, полученные по рассматриваемому УРС мВдВ. В целом они соответствуют данным [6].

В [6] рассчитаны зависимости $P(\rho)$ и $T(P)$ вдоль ударной адиабаты с начальными характеристиками $\rho_0 = 1.507$ г/см³, $P_0 \approx 0$ ($T_0 = 4$ К). Первая из них приведена на рис. 19, вторая — на рис. 20 (косая черта на этих рисунках — место сшивки моделей DFT-MD и PIMC). На этих рисунках показаны также расчетные зависимости $P(\rho)$ и $T(P)$ по модели ТФПК (ТФ с поправками [32, 34]) и УРС мВдВ при $\rho_0 = 0.01, 0.1, 1.507$ г/см³. В последнем случае максимальное отличие УРС мВдВ от расчетных данных [6] составляет $\approx 10\%$ по ρ и $\approx 30\%$ по T . При $P > 100$ ГПа примерно то же согласие имеется с моделью ТФПК. В среднем, как видно из рис. 19, 20, зависимости УРС мВдВ соответствуют модели ТФПК также и при $\rho_0 = 0.01, 0.1$ г/см³. На рис. 21 показана модельная степень ионизации $\alpha = N_e/\bar{N}_0$ вдоль ударных адиабат с рассматриваемыми значениями ρ_0 по модели ТФПК и УРС мВдВ. Осцилляции модельных зависимостей мВдВ по отношению к ТФПК качественно подобны осцилляциям Саха по отношению к модели ТФ в области низкой плотности [35]. Вдоль ударных адиабат немонотонность мВдВ сглаживается с увеличением ρ_0 . Предельное ударное сжатие $\sigma_{max} = \rho_{max}/\rho_0$ увеличивается от 4.84 до 7.64 при уменьшении ρ_0 от 1.507 до 0.01 г/см³.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе упрощенного варианта модифицированной модели Ван-дер-Ваальса построено широкодиапазонное полуэмпирическое УРС неона с учетом испарения и термической ионизации. В пределе низкой плотности разработанное УРС переходит в УРС смеси идеальных газов атомов, ионов и электронов по Саха. Оно также способно к воспроизведению данных (экспериментальных и теоретических) по низкотемпературному (холодному) сжатию вещества. В промежутке между этими областями УРС осуществляет сравнительно простую интерполяцию.

Конкретизирующие УРС эмпирические функции представлены простыми выражениями. Они имеют небольшое число свободных параметров, которые подобраны исходя из, по возможности, лучшего описания экспериментальных данных. Результаты расчетов,

проведенных с применением разработанного уравнения, в большинстве случаев согласуются с данными опытов по изотермическому и ударному сжатию до давления $\approx 1\,000$ ГПа и температуры $\approx 10^5$ К с точностью несколько процентов по плотности. Вне экспериментально изученной области состояний ударная адиабата конденсированного Не при начальной плотности $\rho_0 = 1.507$ г/см³ отличается от ударной адиабаты, вычисленной по моделям DFT-MD и PIMC, максимально на $\approx 10\%$ по плотности. Имеется также в среднем хорошее согласие с ударными зависимостями по модели ТФ с поправками при $\rho_0 = 0.01, 0.1, 1.507$ г/см³. Разработанное уравнение состояния представляется полезным для определения свойств Не в задачах с изменением плотности и температуры на несколько порядков. Описанный в работе модельный подход, не требующий проведения сложных вычислений, может быть применен для построения уравнений состояния также и других веществ.

Автор выражает благодарность В. В. Хрусталеву за расчеты по модели ТФ с поправками и полезное обсуждение некоторых вопросов.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Данная работа финансировалась за счет средств бюджета РФЯЦ-ВНИИ экспериментальной физики.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Wilson H. F., Militzer B.** Sequestration of noble gases in giant planet interiors // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — V. 104, N 12. — 121101. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.121101.
2. **Жарков В. Н., Трубицин В. П.** Физика планетных недр. — М.: Наука, 1980.
3. **Kerley G. I., Henry P. M.** Theoretical equations of state for the rare gases. — LA-8062 UC-34, 1980.
4. **Katti R. S., Jacobsen R. T., Stewart R. B., Jahangiri M.** Thermodynamic properties of neon for temperatures from the triple point to 700 K at pressures to 700 MPa // *Adv. Cryog. Eng.* — 1986. — V. 31. — P. 1189–1197. — DOI: 10.1007/978-1-4613-2213-9_132.
5. **Chen Q. F., Zheng J., Gu Y. J., Li Z. G.** Equation of state of dense neon and krypton plasmas in the partial ionization regime // *Phys. Plasmas.* — 2015. — V. 22, N 12. — 122706. — DOI: 10.1063/1.4938036.
6. **Driver K. P., Militzer B.** First-principles simulations and shock Hugoniot calculations of warm dense neon // *Phys. Rev. B.* — 2015. — V. 91, N 4. — 045103. — DOI: 10.1103/PhysRevB.91.045103.
7. **Vlasiuk M., Frascoli F., Sadus R. J.** Molecular simulation of the thermodynamic, structural, and vapor-liquid equilibrium properties of neon // *J. Chem. Phys.* — 2016. — V. 145, N 10. — 104501. — DOI: 10.1063/1.4961682.
8. **Медведев А. Б.** Оценка коэффициентов самодиффузии и взаимной диффузии бинарной смеси на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса // *Физика горения и взрыва.* — 2017. — Т. 53, № 4. — С. 58–71. — DOI: 10.15372/FGV20170406. — EDN: ZBNFEB.
9. **Aasen A., Hammer M., Lasala S., Jaubert J.-N., Wilhelmson Ø.** Accurate quantum-corrected cubic equations of state for helium, neon, hydrogen, deuterium and their mixtures // *Fluid Phase Equilib.* — 2020. — V. 524. — 112790. — DOI: 10.1016/j.fluid.2020.112790.
10. **Медведев А. Б.** Уравнение состояния и коэффициенты переноса аргона на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса до давлений 100 ГПа // *Физика горения и взрыва.* — 2010. — Т. 46, № 4. — С. 116–126. — EDN: OPWJRR.
11. **Медведев А. Б.** Уравнение состояния диоксида кремния с учетом испарения, диссоциации и ионизации // *Физика горения и взрыва.* — 2016. — Т. 52, № 4. — С. 101–114. — DOI: 10.15372/FGV20160410. — EDN: WGCCQV.

12. **Медведев А. Б.** Модель уравнения состояния с учетом испарения, ионизации и плавления // ВАНТ. Сер. теорет. и прикл. физика. — 1992. — Вып. 1. — С. 12–19.
13. **Медведев А. Б., Трунин Р. Ф.** Ударное сжатие пористых металлов и силикатов // Успехи физ. наук. — 2012. — Т. 182, № 8. — С. 829–846. — DOI: 10.3367/UFNr.0182.201208b.0829. — EDN: PDIBUR.
14. **Медведев А. Б.** Широкодиапазонное многофазное уравнение состояния железа // Физика горения и взрыва. — 2014. — Т. 50, № 5. — С. 91–108. — EDN: SOCGDV.
15. **Больцман Л.** Лекции по теории газов. — М.: ГИТТЛ, 1956.
16. **Копышев В. П.** Теория уравнений состояния. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009.
17. **Копышев В. П., Медведев А. Б., Хрусталева В. В.** Термодинамика низкотемпературной плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / под общ. ред. акад. В. Е. Фортова. Сер. Б: Справочные приложения, базы и банки данных. Т. III-1: Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы / под ред. А. Н. Старостина, И. Л. Иосилевского. — М.: Физматлит, 2004. — С. 59–110.
18. **Ландау Л. Д., Лифшиц И. М.** Статистическая физика. — М.: Наука, 1964.
19. **Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортов В. Е.** Термодинамика сильносжатой плазмы мегабарного диапазона давлений // Письма в ЖТФ. — 1982. — Т. 8, № 22. — С. 1378–1381.
20. **Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортов В. Е.** Термодинамика ударно-сжатой плазмы в квазихимическом представлении // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / под общ. ред. акад. В. Е. Фортова. Сер. Б: Справочные приложения, базы и банки данных. Т. III-1: Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы / под ред. А. Н. Старостина, И. Л. Иосилевского. — М.: Физматлит, 2004. — С. 111–139.
21. **Калиткин Н. Н., Козлитин И. А.** Модель Саха с неточечными ионами // Докл. АН. — 2016. — Т. 471, № 5. — С. 533–536. — DOI: 10.7868/S0869565216350103. — EDN: XGWGTD.
22. **Радциг А. А., Смирнов Б. М.** Параметры атомов и атомных ионов: справочник. — М.: Энергоиздат, 1986.
23. **Ландау Л. Д., Лифшиц И. М.** Квантовая механика. — М.: Наука, 1963.
24. **Thermophysical Properties of Fluid Systems, NIST Webbook.** — URL: <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid>.
25. **Kortbeek P. J., Biswas S. N., Schouten J. A.** Measurement of the compressibility and sound velocity of neon up to 1 GPa // Int. J. Thermophys. — 1988. — V. 9, N 5. — P. 803–812. — DOI: 10.1007/BF00503246.
26. **Anderson M. S., Fugate R. Q., Swenson C. A.** Equation of state for solid neon to 20 kbar // J. Low. Temp. Phys. — 1973. — V. 10, N 3-4. — P. 345–357. — DOI: 10.1007/BF00654913.
27. **Finger L. W., Hazen R. M., Zou G., Mao H. K., Bell P. M.** Structure and compression of crystalline argon and neon at high pressure and room temperature // Appl. Phys. Lett. — 1981. — V. 39, N 11. — P. 892–894. — DOI: 10.1063/1.92597.
28. **Hemley R. J., Zha C. S., Jephcoat A. P., Mao H. K., Finger L. W., Cox D. E.** X-ray diffraction and equation of state of solid neon to 110 GPa // Phys. Rev. B. — 1989. — V. 39, N 16. — P. 11820–11827. — DOI: 10.1103/PhysRevB.39.11820.
29. **Dewaele A., Datchi F., Loubeyre P., Mezouar M.** High pressure–high temperature equations of state of neon and diamond // Phys. Rev. B. — 2008. — V. 77, N 9. — 094106. — DOI: 10.1103/PhysRevB.77.094106.
30. **Root S., Shulenburg L., Cochrane K., Lopez A., Shelton K., Villalva J., Mattson T. R.** Shock compression response of the light noble gases: neon and helium // 19th Biennial Conf. on Shock Compression of Condensed Matter, June 14–19, 2015, Tampa, Florida, USA.

31. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
32. **Калиткин Н. Н.** Модель атома Томаса — Ферми с квантовыми и обменными поправками // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38, № 5. — С. 1534–1540.
33. **Schwerdtfeger P., Hermann A.** Equation of state for solid neon from quantum theory // Phys. Rev. B. — 2009. — V. 80, N 6. — 064106. — DOI: 10.1103/PhysRevB.80.064106.
34. **Копышев В. П.** О термодинамике ядер одноатомного вещества // Численные методы механики сплошной среды. — 1977. — Т. 8, № 6. — С. 54–67.
35. **Иосилевский И. Л., Грязнов В. К.** О сравнительной точности термодинамического описания свойств газовой плазмы в приближениях Томаса — Ферми и Саха // Теплофизика высоких температур. — 1981. — Т. 19, № 6. — С. 1121–1126.

Поступила в редакцию 25.10.2023.

После доработки 10.01.2024.

Принята к публикации 07.02.2024.
