

## ОБОБЩЕННАЯ ФУНКЦИЯ ГРЮНАЙЗЕНА ДЛЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

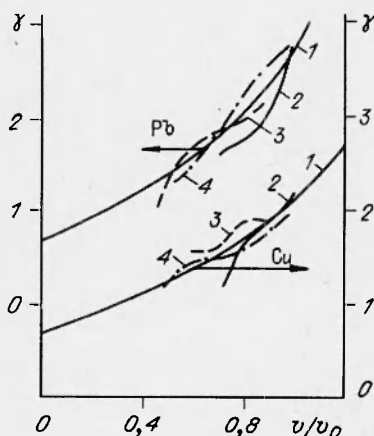
А. М. Молодец

Институт химической физики в Черноголовке,  
142432 Черноголовка

Определение зависимости коэффициента Грюнайзена  $\gamma$  от удельного объема  $v$  — одна из центральных задач в построении уравнения состояния твердого тела (см., например, [1, 2]). Этой проблеме посвящено большое количество работ и, в частности, исследования, опирающиеся на закономерности ударно-волнового сжатия, (например, известный метод сжатия пористых материалов [2]). Однако, базируясь на закономерностях распространения ударных волн в монолитных материалах при различных начальных температурах, можно выявить общий аналитический вид функции Грюнайзена.

Используя соотношения Ренкина — Гюгиона на ударных адиабатах одного и того же монолитного материала при различных начальных температурах и считая, что материал подчиняется уравнению состояния Ми — Грюнайзена  $p - p_x = \gamma(E - E_x)/v$ , можно прийти к следующей зависимости:

$$\gamma(v, v_0, T_0) = -\frac{2(v/v_0)}{v/v_0 - a} + \frac{2}{3}, \quad (1)$$



Зависимость  $\gamma(v/v_0)$ , рассчитанная по (1) для Al и Cu при нормальных начальных условиях (1).

2-4 — данные [4-6] соответственно.

где  $a = 1 + 2/(\gamma_0 - 2/3) - 2p_{x0}/K_0$ ,  $\gamma_0 = \beta c^2/c_v$ ;  $K_0 = c^2/v_0$  — адиабатический модуль объемного сжатия при начальных удельном объеме  $v_0$  и температуре  $T_0$ ;  $\beta$  — коэффициент теплового расширения,  $c_v = c_{vl} + c_{xe}$  — суммарная теплоемкость,  $c_{vl}$ ,  $c_{xe}$  — решеточная и электронная удельные теплоемкости;  $p_{x0}$  — упругое давление, равное с обратным знаком тепловому  $p_{t0}$  в точке  $(v_0, T_0)$ . Функция (1) содержит лишь общие фундаментальные характеристики материала и поэтому претендует на общность зависимости  $\gamma(v)$  для конденсированных сред. Справедливость (1) для металлов продемонстрирована на рисунке.

Функция (1) дает правильные физические результаты и при расчете нулевой изотермы твердого тела. Так, приравняв (1) при нулевой начальной температуре соотношению Слэтера  $\gamma_{sl}(x)$

$$\gamma_{sl}(x) = -\frac{2}{3} - \frac{x}{2} \left( \frac{\partial^2 p_x / \partial x^2}{\partial p_x / \partial x} \right) = -\frac{2x}{x - a} + \frac{2}{3} \quad (2)$$

и интегрируя (2) в области  $x < a$  при соответствующих начальных условиях, можно найти выражение для давления  $p_x(x)$  (а затем и энергии)

вдоль нулевой изотермы:

$$p_x(x) = -K_{00}(F(x) - F(x_0))g - p_{t0}, \quad (3)$$

где  $F(x) = 3(-a^4x^{-5/3}/5 + 2a^3x^{-2/3} + 6a^2x^{1/3} - ax^{4/3} + x^{7/3}/7)$ ;  $x_0 = v_0/v_{0a}$ ;  $v_0$  — удельный объем при нормальных условиях;  $g = x_{00}^{5/3}(x_{00} - a)^{-4}$ ,  $x_{00} = v_{00}/v_{0a}$ . Удельный объем  $v_{00}$  и модуль объемного сжатия  $K_{00}$  берутся при  $T = 0$  и атмосферном давлении. В (2), (3) принято обозначение  $x$  для относительного удельного объема  $x = v/v_{0a}$ , т. е. текущий объем  $v$  относится к значению  $v_{0a}$ , при котором давление на нулевой изотерме равно нулю и соответственно значение  $a$  определяется выражением  $a = 1 + 2/(\gamma_{0a} - 2/3)$ , где  $\gamma_{0a}$  в соответствии с (1) — термодинамический параметр Грюнайзена при начальных условиях  $v = v_{0a}$ ,  $T = 0$ .

Для практического применения этих соотношений необходимо знать две величины:  $a$  и  $v_{0a}$ . Экспериментально определяемое значение  $v_{00}$  превышает  $v_{0a}$  из-за расширения кристаллической решетки, вызванного нулевыми колебаниями. Приближенная оценка этого эффекта, как известно, дается формулой  $v_{0a} = v_{00}(1 - p_{n0}/K_{00})$ , где  $p_{n0}$  — давление нулевых колебаний. Тогда величина  $a$  может быть найдена как корень уравнения  $p_x(x_{0a}) = 0$ , т. е. приравниванием давления на нулевой изотерме (3) нулю при  $v = v_{0a}$ . Однако в связи с тем, что формула для  $v_{0a}$  приближенная, при вычислении  $v_{0a}$  введем корректирующий множитель  $1/s$  ( $v_{00} = v_{0k}/s$ ), где  $v_{0k}$  — справочное значение удельного объема при нулевой температуре и атмосферном давлении. При этом величина  $s$  подбирается так, чтобы наилучшим образом описать экспериментальные данные.

В качестве примера ниже приведены величины параметров, входящих в (3), соответственно для Al и Pb:  $s = 0,999923$  и  $0,999575$ ,  $\rho_{0k} = 1/v_{0k} = 2,765$  и  $11,586$  г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{0a} = 1/v_{0a} = 2,789414$  и  $11,609162$  г/см<sup>3</sup>,  $\rho_0 = 1/v_0 = 2,73$  и  $11,34$  г/см<sup>3</sup>,  $\gamma_{0a} = 1,798175$  и  $2,583821$ ,  $K_{00} = 88,0$  и  $48,77$  ГПа,  $p_{t0} = 1,8809$  и  $1,087$  ГПа. Используя эти величины, можно убедиться, что расчеты по (3) для нулевой изотермы упомянутых металлов практически совпадают с общепризнанными результатами работ [3, 4] до давлений 200 ГПа, а также с нулевыми изотермами из [5], например, для Al до  $p = 5$  ГПа.

Данная работа частично финансировалась Международным научным фондом (Грант № NJ8000).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
2. Зельдович Я. В., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
3. Альтшулер Л. В., Кормер С. Б., Баканова Л. А., Трунин Р. Ф. Уравнения состояния алюминия, меди и свинца для области высоких давлений // ЖЭТФ. 1960. Т. 38, вып. 3. С. 790–798.
4. Rice M. H., McQueen R. G., Walsh J. M. Compression of solids by strong shock waves // Solid State Phys. 1958. V. 6. P. 1–63.
5. Бушман А. В., Ломоносов В. Е., Фортов В. Е. М., 1989. (Препр. / АН СССР. Ин-т высоких температур; № 6. С. 287.)
6. Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е., Кузьменков Е. А. Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов // ПМТФ. 1987. № 1. С. 134–146.

Поступила в редакцию 15/VII 1994 г.