

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УДАРНО-СЖАТОГО НИТРОМЕТАНА

Б. Н. Кондриков

РХТУ им. Д. И. Менделеева, 125047 Москва, bkondr@rctu.ru

Предложен метод расчета термодинамических параметров органического вещества, сжатого ударной волной в области, для которой невозможно независимое построение изоэнтроп из-за отсутствия соответствующих исходных значений энтропии. Метод основан на том, что в пространстве, где на известном массиве исходных термодинамических величин с помощью ударно-волновых экспериментов без разрывов и изломов определены зависимости скорости волны, давления и внутренней энергии от массовой скорости в каждой точке пространства, возможно однозначное вычисление всех термодинамических параметров состояния без введения дополнительной информации. Параметр Грюнайзена и скорость звука находятся дифференцированием семейства ударных адиабат, полученных при разной начальной температуре, теплоемкость, температура и энтропия — интегрированием вдоль ударной адиабаты в координатах «массовая скорость — температура», причем массовая скорость рассматривается как независимая переменная, такая же, как классические параметры состояния (давление, температура, удельный объем и др.). Метод применен для термодинамического описания ударно-сжатого нитрометана.

Ключевые слова: термодинамика, ударные волны, ударный разогрев, уравнение состояния, параметры состояния.

ВВЕДЕНИЕ

Термодинамические параметры состояния органических веществ во фронте ударной волны представляют общий интерес и, в частности, важны для расчета кинетических характеристик реакций химического превращения ударно-сжатого вещества. Эти параметры получают, как правило, путем анализа ударных адиабат. Из уравнения ударной адиабаты, обычно измеряемой в виде зависимости скорости волны от массовой скорости, с помощью уравнений сохранения массы, импульса и энергии легко рассчитываются давление, удельный объем и удельная внутренняя энергия. Расчет остальных термодинамических величин требует, как принято полагать, привлечения дополнительной информации. Например, задав зависимость удельной теплоемкости от температуры и зависимость параметра Грюнайзена от удельного объема, можно вдоль ударной адиабаты рассчитать температуру и энтропию. Принудительное введение удельной теплоемкости и параметра Грюнайзена — существенное ограничение этого подхода для неорганических веществ, еще менее приемлемое для

органических соединений, где теплоемкость и параметр Грюнайзена являются функциями и удельного объема, и температуры и практически не могут быть определены независимо. Для преодоления этого затруднения Я. Б. Зельдович [1] предложил использовать соотношения, связывающие семейство ударных адиабат, полученных при разной начальной температуре или разной начальной плотности вещества, с семейством соответствующих изоэнтроп. Метод Зельдовича был существенно развит В. Е. Фортовым и успешно применен им с соавторами для термодинамического описания цезиевой плазмы [2, 3], нескольких металлов [4, 5] и фторида лития [5].

В работе [6], появившейся примерно в то же время, что и работы [2, 3, 5], было отмечено, что для органических жидкостей применение метода [1], равно как и метода [2, 3, 5], существенно ограничено тем обстоятельством, что их параметры начального состояния могут быть определены лишь в узком интервале начальных температур (между температурами плавления и кипения). Соответственно сетка изоэнтроп покрывает лишь малую часть пространства, в котором при ударно-волновых измерениях определяются параметры p , v , E . Диапазон начальных температур можно расширить, если ударные адиабаты и термоди-

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 01-03-32610).

намические константы жидкости измерять при повышенном исходном давлении. К сожалению, такие ударно-волновые опыты пока не проводились.

Для того чтобы преодолеть это затруднение, авторы [6] предложили проводить интегрирование системы термодинамических уравнений вдоль полосы, вырезаемой в плоскостях $p-v$, $E-v$, $T-v$ и $S-v$ несколькими близко расположенными ударными адиабатами, опирающимися на исходные значения p_0 , E_0 , T_0 , S_0 и v_0 . Поскольку при сжатии удельный объем v изменяется слабо, а все остальные перечисленные параметры состояния быстро растут, методика интегрирования получилась весьма громоздкой. Пришлось по мере повышения давления резко уменьшать шаг изменения v , а для расчета теплоемкости на каждом шаге определять зависимость $E(T, v)$ при данном значении v по пяти близко расположенным ($\Delta T_0 = 0,007$ К) ударным адиабатам и дифференцировать полученную функцию, вычисляя $c_v = (\partial E / \partial T)_v$. Вероятно, поэтому подходы, изложенные в [6], в течение трех десятилетий после публикации практически не использовались, если не считать учебного пособия [7], где параметр Грюнайзена было предложено находить в рамках метода [6], а теплоемкость рассчитывать по модифицированному методу Эйнштейна [8].

В данной работе описан метод расчета термодинамических параметров органического вещества по данным ударно-волновых измерений, не требующий предварительного задания функций $c_v(v, T)$ и $\Gamma(v, T)$ и значительно более простой и удобный в расчетном плане, чем метод [6].

РАЗРАБОТКА МЕТОДА РАСЧЕТА

Имеем систему ударных адиабат:

$$U = U(u, T_0, C_0, v_0), \quad (1)$$

и уравнений сохранения:

$$v = v_0(1 - u/U), \quad p = p_0 + uU/v_0,$$

$$E = E_0 + (p + p_0)(v_0 - v)/2,$$

$$H = H_0 + (p - p_0)(v_0 + v)/2, \quad (2)$$

определенную без разрывов и изломов в части пространства (U, u, p, v, T, E, S) , начиная от исходных значений соответствующих величин.

Общее термодинамическое соотношение рассматриваем в «инертной» форме:

$$TdS = dE + pdv. \quad (3)$$

Введем функцию

$$\begin{aligned} \Gamma &= v \left(\frac{\partial p}{\partial E} \right)_v = \frac{v}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v = \\ &= v \left(\frac{\partial p}{\partial v_0} \right)_v \left(\frac{\partial v_0}{\partial E} \right)_v = \frac{\alpha_p C^2}{c_p}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\alpha_p = (\partial v / \partial T)_p / v$ — коэффициент теплового расширения; $c_p = (\partial H / \partial T)_p$ — удельная теплоемкость при постоянном давлении, c_v — при постоянном объеме; $C^2 = -v^2 (\partial p / \partial v)_S$ — квадрат скорости звука. Эта функция — аналог параметра Грюнайзена. Она отличается от классического определения этого параметра тем, что содержит полную удельную теплоемкость, а не только составляющие, обусловленные упругим взаимодействием, удобна при расчете и может быть определена без интегрирования [7].

Обозначения переменных: U — скорость ударной волны, u — массовая скорость, p — давление, T — температура, v , E , S , H — удельные (на единицу массы) объем, энергия, энтропия и энтальпия. Индексом «нуль» обозначены величины на изобаре $p = p_0$. Относящиеся к этой изобаре производные записываются как полные. Для семейства ударных адиабат, полученных при разной начальной температуре, величина v_0 является такой же независимой переменной, как и все остальные. Производные при постоянном значении v_0 записываются как частные производные.

Параметр Γ найдем, используя соотношение для внутренней энергии на ударной адиабате:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E}{\partial v_0} \right)_v &= \frac{dE_0}{dv_0} + \frac{1}{2} \left[(v_0 - v) \left(\frac{\partial p}{\partial v_0} \right)_v + p + p_0 \right] = \\ &= \frac{C_0^2}{\Gamma_0 v_0} + \frac{uU}{2v_0} (\tau + 1). \end{aligned} \quad (5)$$

Подставив (5) в (4), получаем

$$\Gamma = \Gamma_0 \frac{2\tau U(U - u)}{2C_0^2 + \Gamma_0 uU(\tau + 1)}, \quad (6)$$

где

$$\tau = \frac{v_0 - v}{p - p_0} \left(\frac{\partial p}{\partial v_0} \right)_v = \frac{v_0^2}{U^2} \left(\frac{\partial p}{\partial v_0} \right)_v =$$

$$= 2 \frac{v_0}{U} \left(\frac{\partial u}{\partial v_0} \right)_v - 1 = 1 + 2u \frac{(\partial U / \partial u)_v - 1}{U - u(\partial U / \partial u)_v}. \quad (7)$$

Зная Γ , вычисляем скорость звука:

$$C^2 = -v^2 \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_S = v^2 \left(\frac{\partial S}{\partial v} \right)_p \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_v^{-1} = \\ = \frac{U - u}{2} [2(U - u)\sigma - \Gamma u(\sigma - 1)], \quad (8)$$

где

$$\sigma = -\frac{v_0 - v}{p - p_0} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_{v_0} = -\frac{v_0^2}{U^2} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_{v_0} = \\ = -2 \frac{v_0}{U} \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_{v_0} - 1 = \frac{U + u(\partial U / \partial u)_{v_0}}{U - u(\partial U / \partial u)_{v_0}}. \quad (9)$$

Из (7) и (9) видно, что при $u \rightarrow 0$, $U \rightarrow C_0$ значения σ и τ равны единице.

Представляет интерес определение производной dU/du вблизи $u = 0$:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial u} \right)_{v_0} = \left(\frac{\partial C}{\partial u} \right)_{v_0}^0 = \left(\frac{\partial C}{\partial v} \right)_{v_0} \left[\left(\frac{\partial C}{\partial v} \right)_{v_0} \frac{u}{U} - \frac{U}{v_0} \right], \quad (10)$$

где

$$\left(\frac{\partial C}{\partial v} \right)_{v_0} = \left(\frac{\partial C}{\partial v} \right)_p - \left(\frac{\partial C}{\partial v} \right)_{v_0},$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial v} \right)_p^0 = \frac{dC_0}{dv_0} = -r \frac{C_0}{v_0}.$$

Для органических веществ $r \approx 3$ — число Рао [8].

Примем $U = C_0$ при $u = 0$. Из формулы (10) находим

$$\left(\frac{\partial U}{\partial u} \right)_{v_0}^0 = \left(\frac{dU}{du} \right)_0 = r + 1 + \frac{C_0}{2} \frac{d\tau}{du}. \quad (11)$$

Расчет показывает, что последний член в правой части (11) равен $-0,2 \div 0,3$.

Для расчета температуры и энтропии в качестве независимой переменной используем массовую скорость u :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial u} \right)_{v_0} = \left(\frac{\partial T}{\partial v} \right)_{v_0} \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_{v_0}^{-1} = \frac{2\Gamma T}{(U - u)(\sigma + 1)} + \\ + \frac{u \sigma - 1}{c_v \sigma + 1}, \quad (12)$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial u} \right)_{v_0} = \left(\frac{\partial S}{\partial v} \right)_{v_0} \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_{v_0}^{-1} = \frac{u \sigma - 1}{T \sigma + 1}. \quad (13)$$

В формулах (12) и (13) производные T и S по удельному объему получаются из общего термодинамического соотношения, а производная массовой скорости по удельному объему следует из выражения (9).

Удельную теплоемкость находим по формуле

$$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_u + \left(\frac{\partial E}{\partial u} \right)_T \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v = \\ = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_u \left[1 - \left(\frac{\partial E}{\partial u} \right)_T \frac{\Gamma(\tau + 1)}{2\tau(U - u)} \right]^{-1}. \quad (14)$$

Введем выражение для производной температуры ударного сжатия по начальной температуре при постоянной массовой скорости:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial T_0} \right)_u = \left(\frac{\partial T}{\partial T_0} \right)_v - \left(\frac{\partial T}{\partial u} \right)_{v_0} \left(\frac{\partial u}{\partial T_0} \right)_v = \\ = \alpha_p^0 U \left[\frac{\tau(U - u)}{\Gamma c_v} - \frac{\tau + 1}{2} \left(\frac{\partial T}{\partial u} \right)_{v_0} \right], \quad (15)$$

где $(\partial T / \partial u)_{v_0}$ определено в (12).

Прежде чем рассчитывать температуру, оценим начальный рост ее вблизи $u = 0$. Из общего соотношения (3) следует, что тепловая составляющая дифференциала внутренней энергии равна

$$dE_T = c_v dT = dE - \left(\frac{\Gamma c_v T}{v} - p \right) dv.$$

Отношение прироста тепловой составляющей внутренней энергии (dE_T) к увеличению полной внутренней энергии в результате сжатия (dE) составляет

$$\left(\frac{\partial E_T}{\partial E} \right)_{v_0} = 1 + \left[\frac{\Gamma c_v T}{v} - p \right] \left[- \left(\frac{\partial E}{\partial v} \right)_{v_0} \right]^{-1}. \quad (16)$$

При ударном и изоэнтропическом сжатии $(\partial E / \partial v)_{v_0} < 0$, поэтому, по крайней мере до тех пор, пока $p_T = \Gamma c_v T / v > p$, из (16) следует, что прирост тепловой составляющей внутренней энергии больше прироста общей внутренней энергии вещества [9, 10]. Приняв осредненно для органических веществ $c_v^0 = 1,5$ кДж/(кг·К), $\Gamma_0 = 1$, $T_0 = 300$ К, $v_0 = 1 \cdot 10^{-3}$ м³/кг, находим $p_T \approx 0,5$ ГПа. При сжатии тепловая составляющая давления растет, поэтому следует ожидать повышенного значения производной $(\partial T / \partial p)_{v_0}$ при малой степени

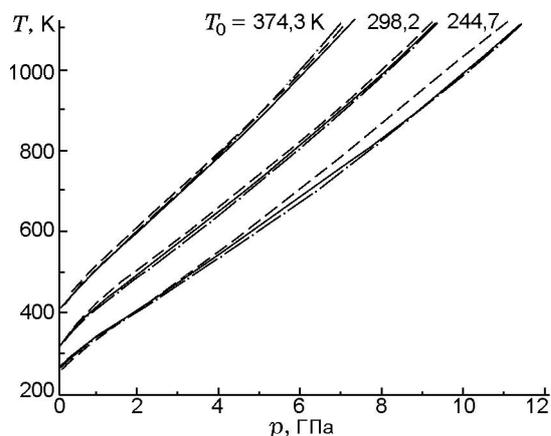


Рис. 1. Зависимость температуры ударного разогрева от давления в ударной волне в НМ: штриховые линии — зависимости из [6], штрихпунктирные — расчет при $s = 1,68$, $b = 262$ м/с, $G = 1000 - 2,7T_0$, сплошные линии — при $s = 1,57$, $b = 630$ м/с, G — по формуле (18)

сжатия и уменьшения ее при росте давления (до ≈ 1 ГПа).

Существенно, что значительный рост тепловой составляющей внутренней энергии при малой степени сжатия совсем не означает чрезмерно быстрого начального роста температуры. При $u = 0$ величина

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_{v_0}^0 = \frac{\Gamma_0 v_0 T_0}{C_0^2}$$

при использованных выше значениях переменных составляет 300 К/ГПа — примерно втрое больше, чем в среднем по принятому для расчета интервалу давлений (см. рис. 1).

Добавим, что из соотношения между скоростью звука, скоростью ударной волны и массовой скоростью можно найти еще одну термодинамическую величину — показатель изэнтропы:

$$\gamma_S = \frac{C^2}{u(U - u) + p_0 v_0 (U - u)/U}$$

ПРИМЕР РАСЧЕТА

В качестве примера расчета рассмотрим данные по ударному сжатию нитрометана (НМ).

Исходные данные. Температура плавления нитрометана $244,60 \div 244,73$ К [11]. В данной работе принято значение $244,7$ К. Теплота плавления $\Delta H_m^0 = 9,70$ кДж/моль. Температура кипения $T_b = 374,36$ К [11], энтальпия

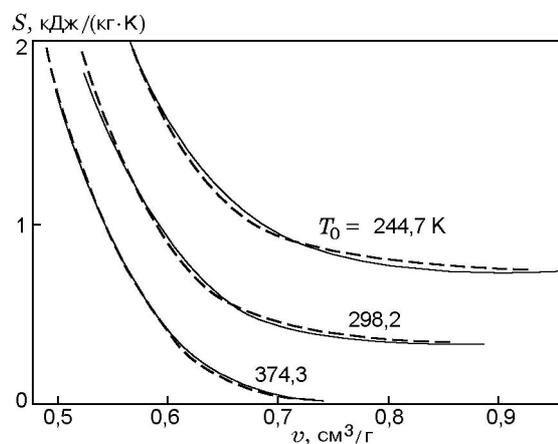


Рис. 2. Изменение энтропии при уменьшении удельного объема в результате ударно-волнового сжатия НМ:

штриховые линии — зависимости из [6], сплошные — расчет по ударной адиабате (17) при $s = 1,57$, $b = 630$ м/с, G — по формуле (18)

испарения при температуре кипения $\Delta H_v = 33,97$ кДж/моль, $\Delta H_{v298} = 38,4$ кДж/моль. Число Трутона в случае НМ, в отличие от многих других нитросоединений, имеет обычное значение $T_r = \Delta H_{v298}/RT_b = 10,91$. Энтропия жидкого НМ $S_{298}^0(l) = 171,75$ Дж/(моль · К) = $2,814$ кДж/(кг · К). Энтропия газообразного НМ $S_{298}^0(g) = 275,0$ Дж/(моль · К) = $4,505$ кДж/(кг · К). Энтальпия образования $\Delta H_{f298}(l) = -113,1$ кДж/моль.

Зависимости плотности и скорости звука в жидком НМ от температуры определены в [6]:

$$\rho_0 = 1,539 - 1,400T_0 \text{ [кг/м}^3\text{]}, \quad 255 < T_0 < 365 \text{ К,}$$

$$C_0 = 2,585 - 4,280T_0 \text{ [м/с]}, \quad 245 < T_0 < 353 \text{ К.}$$

Выражение для определения теплоемкости также приведено в [6]:

$$c_p^0 = 1550 + 0,617T_0 \text{ [Дж/(кг · К)].}$$

Полином третьей степени

$$U = C_0 + 2,402u + 0,550u^2 - 0,125u^3 \text{ [км/с]}$$

$$(R = 0,99803, SD = 0,052),$$

где R — коэффициент корреляции, SD — квадратное отклонение, хорошо описывает экспериментальные данные [6] по ударному сжатию НМ в интервале $249 < T_0 < 363$ К, но не содержит зависимости коэффициентов от начальной

температуры, не вполне удовлетворяет условию (11) и не обладает необходимой степенью термодинамической совместности. Термодинамическая совместность часто применяемого полинома второй степени еще хуже.

В [6] ударная адиабата НМ приведена в виде

$$U = C_0 + [(su)^2 + 2su(b + G) + G^2]^{\frac{1}{2}} - G, \quad (17)$$

где s, b — константы. Это более гибкая и удобная для описания экспериментальных данных функция. Однако значения констант в ней, полученные в [6]: $s = 1,68$, $b = 262$ м/с, $G = 1000 - 2,7 T_0$ [м/с], не удовлетворяют условию (11), которое дает

$$G = \frac{bs}{(dU/du)_0 - s}. \quad (18)$$

При проведении вычислений для сравнения с результатами расчетов [6] использовали константы, приведенные в [6]: $s = 1,68$, $b = 262$ м/с, $G = 1000 - 2,7T_0$ [м/с]. В основном варианте расчета варьировали коэффициенты s и b при значении G , отвечающем формуле (18), до наилучшего соответствия (17) экспериментальным данным по зависимости (1). Хорошие результаты в последнем случае получены при $s = 1,57$, $b = 630$ м/с.

Необходимые для расчета параметры τ и σ находим по формулам (7), (9) и (17):

$$\tau = 2 \frac{U - u - C_0 u [r - L(k - m)] / U}{C_0 + mb - G(k - m)} - 1, \quad (19)$$

$$\sigma = \frac{2U}{C_0 + mB - G(k - m)} - 1, \quad (20)$$

где

$$k = \frac{U - C_0}{U - C_0 + G}, \quad m = \frac{su}{U - C_0 + G},$$

$$r = -\frac{1}{\alpha_p^0 C_0} \frac{dC_0}{dT_0}, \quad L = -\frac{1}{\alpha_p^0 C_0} \frac{dG}{dT_0}.$$

Кроме того, для расчета понадобятся следующие величины:

$$\alpha_p^0 = 1,400 v_0 \text{ [K}^{-1}\text{]}, \quad \Gamma_0 = \frac{C_0^2 \alpha_p^0}{c_p^0},$$

$$c_v^0 = \frac{c_p^0}{1 + \alpha_p^0 \Gamma_0 T_0},$$

$$E_0 = \int_{T_{00}}^{T_0} c_p(T) dT - p_0(v_0 - v_{00}),$$

$$S_0 = \int_{T_{00}}^{T_0} \frac{c_p(T)}{T} dT$$

$$(T_{00} = 244,7 \text{ К}, \quad v_{00} = v(T_{00})).$$

Расчет проводился интегрированием уравнений (12)–(15) вдоль двух ударных адиабат, взятых с интервалом $\Delta T_0 = 0,3$ К в координатах $u-T$. Программирование осуществлено на языке C++.

На рис. 1–5 приведены результаты расчета при $T_0 = 244,7; 298,2$ и $373,4$ К, $s = 1,68$, $b = 262$ м/с, $G = 1000 - 2,7T_0$, а также при значениях s, b, G , термодинамически совместных и удовлетворяющих одновременно условию (18) и экспериментальным данным [6] по зависимости $U(u, C_0, T_0)$.

Основной результат вычислений состоит в том, что «интегральные» функции состояния T, S, E (см., например, рис. 1 и 2) относительно слабо зависят от метода расчета и вида ударной адиабаты, если последняя удовлетворяет экспериментальной зависимости (1).

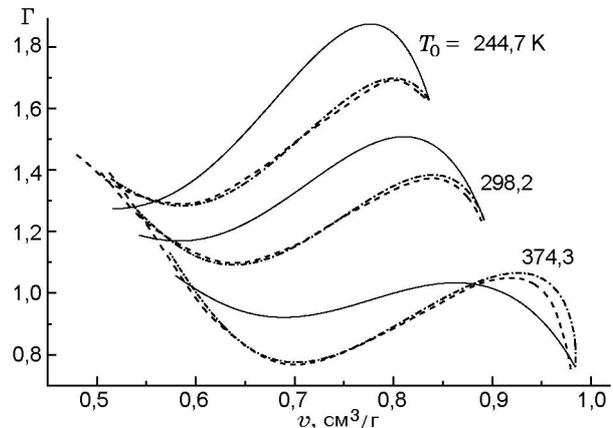


Рис. 3. Зависимость «параметра Грюнайзена» от удельного объема при ударно-волновом сжатии НМ:

штриховые линии — зависимости из [6], штрихпунктирные — расчет при $s = 1,68$, $b = 262$ м/с, $G = 1000 - 2,7T_0$, сплошные — расчет при $s = 1,57$, $b = 630$ м/с, G — по формуле (18)

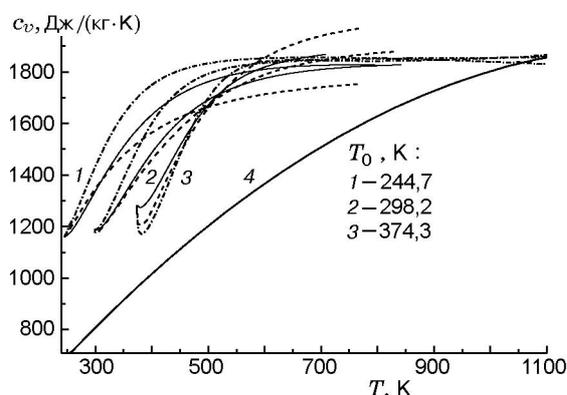


Рис. 4. Изменение удельной теплоемкости в зависимости от температуры при ударном сжатии нитрометана:

штриховые линии — зависимости из [6], штрихпунктирные — расчет при $s = 1,68$, $b = 262$ м/с, $G = 1000 - 2,7T_0$, сплошные — расчет при $s = 1,57$, $b = 630$ м/с, G — по формуле (18), 4 — зависимость удельной теплоемкости НМ в форме идеального газа от температуры [11]

Это обстоятельство автоматически используется во многих работах при расчете температуры ударного разогрева введением априорных значений c_v и Γ (см., например, [12]).

Коэффициенты уравнения ударной адиабаты (17) весьма существенно влияют на параметры c_v и Γ . При значениях s , b , G , взятых из [6] (см. рис. 3), зависимости $\Gamma(v)$ имеют резкий максимум при малой степени сжатия и минимум — при большой. При $s = 1,57$, $b = 630$ м/с и значении G , отвечающем формуле (18), максимум при $T_0 = 244,7$ и $298,2$ К существенно растет, хотя общий вид зависимости $\Gamma(v)$ в целом сохраняется. Для зависимости $c_v(T)$ (см. рис. 4) при s , b , G , взятых из [6], и $T_0 = 244,7$ и $298,2$ К на начальных участках кривых наблюдается минимум. Кривые [6] в координатах $T - c_v$ пересекаются при $T \approx 600$ К, после чего теплоемкость при $T_0 = 373,4$ К становится выше, чем при $T_0 = 298,2$ К и, тем более, чем при $T_0 = 244,7$ К. Очевидно, резкий минимум на кривых зависимости $c_v(T)$ связан с неучетом в [6] условия (11). Пересечение кривых $c_v(T, T_0)$ в [6], вероятно, обусловлено отмеченными во введении особенностями метода расчета, примененного в [6]. В нашем расчете кривые $c_v(T)$ при $T \approx 700$ К сливаются и при дальнейшем повышении температуры теплоемкость ударно-сжатого НМ перестает изменяться. Пересечение с кривой для идеального газа происходит вблизи темпера-

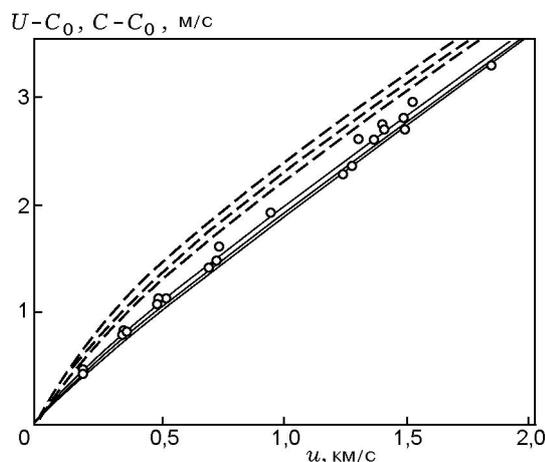


Рис. 5. Зависимость скорости ударной волны ($U - C_0$, сплошные кривые) и скорости звука за ее фронтом ($C - C_0$, штриховые кривые) от массовой скорости:

расчет по (17) при $s = 1,57$, $b = 630$ м/с, G — по формуле (18), $T_0 = 374,3$, $298,2$, $244,7$ К (сверху вниз), точки — результаты экспериментов [6]

туры 1100 К. По-видимому, это предел применимости результатов расчета теплоемкости, температуры и энтропии по данным ударно-волновых измерений для НМ. Примерно этой же точкой ($T \approx 1100$ К, $u \approx 2$ км/с) ограничены и сами ударно-волновые данные (см. рис. 5). Из рис. 5 видно, что использованные нами значения коэффициентов уравнения (17) обеспечивают хорошее согласие уравнения ударной адиабаты с экспериментальными данными [6].

ВЫВОДЫ

Описан метод расчета термодинамических параметров состояния ударно-сжатого органического вещества, для которого известны обобщенная ударная адиабата (1) и зависимости плотности, удельной теплоемкости и скорости звука от начальной температуры на исходной изобаре (при $p = p_0$). Все параметры состояния, включая удельную теплоемкость, определяются в ходе интегрирования, а параметр Грюнайзена и скорость звука — дифференцированием семейства ударных адиабат. Интегрирование проводится в координатах $u - T$ по двум близко расположенным ударным адиабатам, причем массовая скорость u рассматривается как новая термодинамически совместная переменная. Впервые получены термодинамически обусловленные значения производных $(dU/du)_0$ и $(dT/dp)_0$ при $u = 0$ на удар-

ных адиабатах и построено уравнение ударной адиабаты, учитывающее величину $(dU/du)_0$. Метод применен для термодинамического описания ударно-сжатого нитрометана. Выявлены неточности, допущенные в ряде предшествующих работ.

Автор благодарен В. Ю. Поликарпову за помощь в программировании и графическом представлении результатов расчета.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Зельдович Я. Б.** Об исследовании уравнения состояния с помощью механических измерений // ЖЭТФ. 1957. Т. 32, вып. 6. С. 1577–1579.
2. **Фортов В. Е., Красников Ю. Г.** О построении термодинамически полного уравнения состояния неидеальной плазмы по динамическим экспериментам // ЖЭТФ. 1970. Т. 59, вып. 5(11). С. 1645–1656.
3. **Ломакин Б. Н., Фортов В. Е.** Уравнение состояния неидеальной цезиевой плазмы // ЖЭТФ. 1972. Т. 63, вып. 10. С. 92–103.
4. **Фортов В. Е.** Построение уравнения состояния конденсированных сред по динамическим экспериментам // Горение и взрыв: Тр. III Всесоюз. симпоз. по горению и взрыву. М.: Наука, 1972. С. 561–564.
5. **Фортов В. Е.** Уравнение состояния конденсированных сред // ПМТФ. 1972. № 6. С. 156–166.
6. **Lysne P. C., Hardesty D.** Fundamental equation of state of liquid nitromethane to 100 kbar // J. Chem. Phys. 1972. V. 59, N 12. P. 6512–6523.
7. **Кондриков Б. Н., Райкова В. М.** Методические указания по курсу «Термодинамика горения и взрыва» (Расчет параметров уравнения состояния). М.: МХТИ им. Д. И. Менделеева, 1981.
8. **Цянь Сюэ-Сень.** Физическая механика. М.: Мир, 1965.
9. **Райкова В. М.** Ударное сжатие органических жидкостей. Химическая физика конденсированных взрывчатых систем // Труды МХТИ им. Д. И. Менделеева. 1979. Вып. 104. С. 99–106.
10. **Кондриков Б. Н.** Детонация: Учебное пособие. М.: МХТИ им. Д. И. Менделеева, 1980.
11. **Сталл Д., Вестрам Э., Зинке Г.** Химическая термодинамика органических соединений. М.: Мир, 1971. С. 540–542.
12. **Афанасенков А. Н., Богомолов В. М., Воскобойников И. М.** Критические давления инициирования взрывчатых веществ // Взрывное дело. № 68/25. М.: Недра, 1970. С. 68–92.

Поступила в редакцию 26/III 2002 г.