

**О РАСЧЕТЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВОДЫ
В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ
ПО СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТОМА**

Г. С. Романов, Ф. Н. Боровик
(Минск)

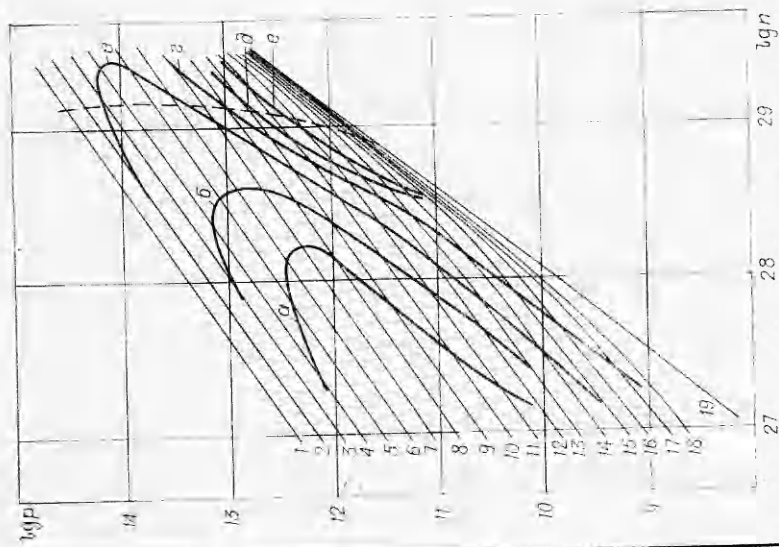
В настоящее время имеются достаточно полные экспериментальные данные, позволяющие получить уравнение состояния воды при давлениях p до 10^{11} Н/м² [1]. Интерполяционное уравнение состояния с учетом экспериментальных данных, относящихся к этой области давлений, построено в работе [2], где для вычисления тепловых частей электронных составляющих энергии и давления использовалась аналитическая аппроксимация решений уравнения Томаса—Ферми, полученных в [3]. Так как экспериментальные данные для давлений выше 10^{11} Н/м² практически исчерпываются приведенными в работе [4] при $p=14,25 \cdot 10^{11}$ Н/м² на ударной адиабате, то представляет интерес расчет термодинамических свойств воды при помощи непосредственного численного решения уравнений статистической модели атома, применимой в области высоких давлений. В данной работе представлены результаты расчетов термодинамических свойств воды при отличной от нуля температуре $T \neq 0$ на основе модели Уилера и произведен в рамках статистической теории атома выбор модели, дающей результаты, наиболее близкие к экспериментальным при высоких давлениях.

Согласно модели Уилера, которая для случая нулевой температуры обсуждается в [5], молекула воды представляется состоящей из двух областей: центральной сферы, занимаемой атомом кислорода, и периферийного слоя, в котором находятся электроны и протоны атомов водорода, образующие свободный электронно-ядерный газ. При $T \neq 0$ и $p \neq 0$ параметры атомов кислорода рассчитываются на основе обобщенной статистической модели атома [3]. Объем молекулы воды определяется приравниванием давления, обусловленного электронами атома кислорода, к давлению газа периферии, причем газ протонов периферии рассматривается как классический.

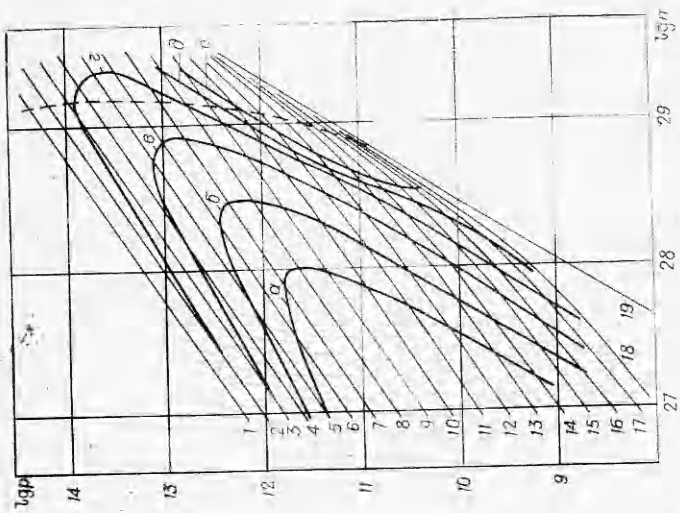
В данной работе численное решение уравнения Томаса—Ферми находилось при помощи метода, разработанного в [6], который позволяет естественным путем строить изотермы. Изотермы, рассчитанные по модели Уилера для 19 значений температур, представлены на фиг. 1, где p — давление в Н/м², а n — число молекул в м³ (1 — $T=1,362 \cdot 10^7$ К; 2 — $T=8,596 \cdot 10^6$ К; 3 — $T=5,425 \cdot 10^6$ К; 4 — $T=3,422 \cdot 10^6$ К; 5 — $T=2,159 \cdot 10^6$ К; 6 — $T=1,362 \cdot 10^6$ К; 7 — $T=8,596 \cdot 10^5$ К; 8 — $T=5,425 \cdot 10^5$ К; 9 — $T=3,422 \cdot 10^5$ К; 10 — $T=2,159 \cdot 10^5$ К; 11 — $T=1,362 \cdot 10^5$ К; 12 — $T=8,596 \cdot 10^4$ К; 13 — $T=5,425 \cdot 10^4$ К; 14 — $T=3,422 \cdot 10^4$ К; 15 — $T=2,159 \cdot 10^4$ К; 16 — $T=1,362 \cdot 10^4$ К; 17 — $T=8,596 \cdot 10^3$ К; 18 — $T=5,425 \cdot 10^3$ К; 19 — $T=342,2$ К). Использовались результаты, полученные для $T=342,2$ К, поскольку они незначительно отличаются от результатов холодной модели ($T=0$). На фиг. 1 представлены также линии постоянных значений γ ($a - \gamma=1,5$; $b - \gamma=1,55$; $c - \gamma=1,6$; $d - \gamma=1,65$; $e - \gamma=1,7$; $f - \gamma=1,8$). Значение параметра γ определялось по формулам

$$(1) \quad \gamma = 1 + \frac{P - P_0}{\epsilon - \epsilon_0} v \quad \text{при } v < v_0,$$

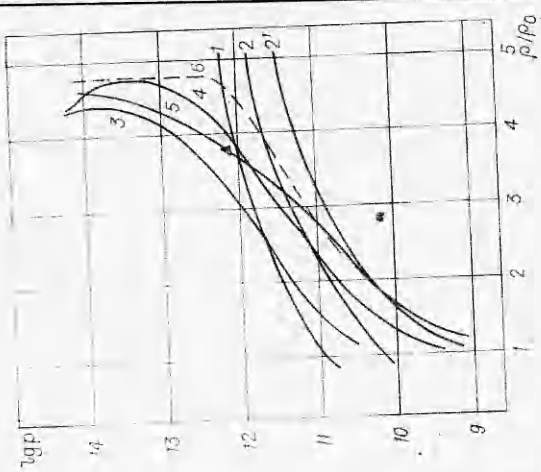
$$\gamma = 1 + \frac{P - P_x(v)}{\epsilon - \epsilon_x(v)} v \quad \text{при } v > v_0,$$



Фиг. 1



Фиг. 2



Фиг. 3

где v , ϵ и p — соответственно объем молекулы воды, полная энергия молекулы и полное давление, обусловленное как электронами и протонами периферии, так и движением ядер кислорода; p_0 , ϵ_0 , v_0 — полное давление, энергия и объем молекулы при $T=342,2$ К и нормальной плотности воды; $p_x(v)$ и $\epsilon_x(v)$ — полное давление и энергия молекулы при $T=342,2$ К и объеме молекулы v . Состояния, удовлетворяющие уравнению ударной адиабаты, определялись вычислением параметра $L = \frac{1}{2} \frac{(p - p_0)(v_0 - v)}{\epsilon - \epsilon_0}$, который на ударной адиабате равен единице. Значения p и v , обращающие L в единицу, находились путем интерполяции. Полученная таким образом ударная адиабата представлена на фиг. 1 штриховой кривой. В качестве другой возможной модели, описывающей поведение воды при высоких давлениях, была взята обобщенная статистическая модель для атома кислорода. Результаты расчета 19 изотерм приведены на фиг. 2 (значения температур те же, что и на фиг. 1). На фиг. 2 ударная адиабата представлена штриховой кривой и также показаны линии постоянных значений γ ($a - \gamma=1,4$; $b - \gamma=1,45$; $c - \gamma=1,5$; $d - \gamma=1,55$; $e - \gamma=1,6$; $e - \gamma=1,65$), определенных по (1). На фиг. 3 приведена сводка данных по ударным адиабатам (кривые 3—5). Здесь же даны кривые холодного сжатия (1— H_2O , 2—O без обмена, 2'—O с обменом [5]), по которым можно составить представление о роли тепловых составляющих давления. Кривая 3 (фиг. 3) — расчет по модели Уилера, кривая 4 — расчет для атома кислорода, кривая 5 — экстраполяция в область давлений выше экспериментальной точки $14,25 \cdot 10^{11}$ Н/м² [4], кривая 6 — расчет из [1]. Ряд результатов численных расчетов ударных адиабат по кислородной модели и модели Уилера для T , p , ρ/ρ_0 , где ρ_0 — нормальная плотность воды, приведен соответственно в табл. 1, 2. Можно видеть, что экспериментальная точка из [4] оказывается ближе всего к нашему расчету для кислорода, в области более низких давлений этот расчет также лежит ближе к экспериментальной зависимости по сравнению с кривой 3.

Таблица 1

T , К	ρ/ρ_0	$p \cdot 10^{-11}$, Н/м ²	γ
5,425 · 10 ³	2,27	0,94	
8,596	2,37	1,06	
1,362 · 10 ⁴	2,52	1,33	2,33
2,159	2,65	1,67	2,18
5,425	3,15	3,83	1,91
8,596	3,51	6,16	1,80
1,362 · 10 ⁵	3,88	10,6	1,72
5,425	4,56	57,4	1,56
1,362 · 10 ⁶	4,74	186	1,53
2,159	4,74	339	1,53
3,422	4,68	575	1,54
5,425	4,58	955	1,56
8,596	4,40	1480	1,58
1,362 · 10 ⁷	4,34	2370	1,60

Таблица 2

T , К	ρ/ρ_0	$p \cdot 10^{-11}$, Н/м ²	γ
5,425 · 10 ³	2,54	3,99	2,29
1,362 · 10 ⁴	2,63	4,96	2,20
2,159	2,75	5,89	2,14
3,422	2,88	7,43	2,06
5,425	3,06	9,93	1,96
8,596	3,28	14,2	1,87
1,362 · 10 ⁵	3,60	22,1	1,80
8,596	4,20	163	1,62
1,362 · 10 ⁶	4,32	288	1,60
2,159	4,36	479	1,59
3,422	4,40	794	1,58
5,425	4,32	1320	1,60
8,596	4,28	2090	1,61
1,362 · 10 ⁷	4,22	3390	1,62

Таким образом, статистическая модель атома кислорода, которой, согласно приведенному сопоставлению с экспериментом, можно пользоваться при $p \geq 10^{12}$ Н/м² для описания ударного сжатия воды, оказывается более предпочтительной, чем модель Уилера. Более сложная в вычислительном отношении модель Уилера приводит к существенному завышению

давления по сравнению с экспериментальным, поэтому применение ее в рассматриваемых условиях представляется нецелесообразным.

Авторы выражают благодарность Г. Ф. Горбачевой за проведение численных расчетов.

Поступила 27 III 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Papetti R. A., Fujisaki M. The Rice and Walsh equation of state for Water.— «J. Appl. Phys.», 1968, vol. 39, N 12, p. 5412.
2. Замышляев Б. В., Менжулин М. Г. Интерполяционное уравнение состояния воды и водяного пара.— ИМТФ, 1971, № 3, с. 113.
3. Latter R. Temperature behavior of the Thomas—Fermi statistical model for atoms.— «Phys. Rev.», 1955, vol. 99, N 6, p. 1854.
4. Подурец М. А., Смаков Г. В., Трунин Р. Ф., Попов Л. В., Моисеев Б. Н. Сжатие воды сильными ударными волнами.— ЖЭТФ, 1972, т. 62, вып. 2, с. 710.
5. Latter A., Latter R. Equation of state of water on the Thomas—Fermi model.— «J. Chem. Phys.», 1956, vol. 25, N 5, p. 1016.
6. Горбачева Г. Ф., Ельяшевич М. А., Романов Г. С., Скобля Н. С., Станциц Л. К. Расчет термодинамических свойств вещества по модели атома Томаса—Ферми.— «Вестн. БГУ», 1974, сер. 1, № 2, с. 62; Термодинамические свойства вещества по обобщенной статистической модели атома.— ТВТ, 1975, т. 13, № 1, с. 61.

УДК 531.663

ДЕФОРМАЦИЯ СВИНЦОВЫХ ДИСКОВ ПРИ УДАРЕ

В. К. Боболев, В. Л. Боднева, А. В. Дубовик

(Москва)

Рассматривается ударное воздействие с относительно малыми (1—3 м/с) скоростями на тонкий диск из несжимаемого вязкопластического материала, помещенный в зазор между параллельными шероховатыми поверхностями. Предполагается, что напряженное состояние прослойки близко к гидростатическому в течение времени удара, длительность которого ограничена вследствие упругой деформации элементов системы ударника. Математическая задача об определении полей напряжений, скоростей и температур в случае осесимметричной деформации диска сводится к интегрированию обыкновенного дифференциального уравнения 2-го порядка. Для некоторых случаев удара приведены численные расчеты, которые сравниваются с результатами опытов со свинцовыми образцами.

Случай плоской деформации прослойки из вязкопластического материала, помещенной между жесткими плитами, сдвигающимися с постоянной скоростью, рассмотрен в [1]. Напряженное состояние прослойки при том же условии о движении плит в случае осевой симметрии изучено в [2]. В данной работе принимается во внимание ударный характер нагружения и упругое сжатие элементов системы ударника, от которых зависят деформации и развивающееся давление удара.

Рассмотрим осевое сжатие тонкого ($\delta_0 \ll R$, R — радиус; δ_0 — толщина) диска из вязкопластического материала, помещенного между параллельными шероховатыми плитами. После упрощений, следующих из малости отношения δ/R , уравнения движения и неразрывности среды в