05

Аналитическое определение энергии и давления тела при произвольном сжатии на основе его опытной ударной адиабаты

© Т.А. Олесницкий, М.Ф. Сарры, С.Г. Скидан

Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (ФГУП „РФЯЦ-ВНИИЭФ"),
Институт теоретической и математической физики (ИТМФ)
607189 Саров, Нижегородская область, Россия
e-mail: t_oles@vniief.ru

(Поступило в Редакцию 28 января 2013 г.)

Получены аналитические выражения для давления и энергии тела в рамках классической статистики, основанных на его опытной ударной адиабате, уравнении Ми–Грюнайзена и теоремы вириала для этого тела. В качестве потенциала взаимодействия между его структурными частицами взят однородный некулоновский отталкивающий потенциал n-й степени однородности.

Введение

В настоящей работе предлагается простая аналитическая схема построения зависимостей энергии $E_{\text{ar}}(\rho, T)$ и давления $P_{\text{ar}}(\rho, T)$ тела при произвольном (неударном) его сжатии на основе данных его опытной ударной адиабаты (УА) и теоремы вириала (ТВ). Эти зависимости получены в приближении Ми–Грюнайзена и классического варианта ТВ для однородных и неоднородных затравочных потенциалов. Последние представляют собой суммы однородных, отличных от нуля центральных некулоновских потенциалов заданного порядка однородности, которые, по предположению, действуют между двумя атомами как целыми единицами тела. Ключевым моментом в этой схеме, как и всегда в вопросах аналитического расчета термодинамических функций тела, остается вопрос о форме среднего потенциала некулоновского характера, с которым взаимодействуют друг с другом хотя бы два структурных объекта (атомы, молекулы) изучаемого тела. Даже в предположении центрального и двухчастичного характера этого потенциала (например, потенциалы Леннарда–Джонса, Слэтера, см. ниже) этот вопрос (т. е. решение обратной задачи) до сих пор не имеет внятного решения. Учет же нецентральности силы взаимодействия (линия действия силы не совпадает с линией, соединяющей геометрические центры атомов) и многочастичного характера взаимодействия (например, трехатомный аналог потенциала Леннарда–Джонса) сильно усложняет (технически) проблему. Поэтому фактическим аргументом в пользу выбора конкретного затравочного потенциала в твердом теле была и остается его аналитическая простота с минимально возможным числом свободных (подгоночных) параметров, разумные численные значения которых могут быть качественно обоснованы в рамках так называемого „здравого смысла". Наиболее широкое практическое распространение имеют (из-за своей простоты) степенной центральный неоднородный потенциал Леннарда–Джонса:

$$U(r) = A_1/r^{12} - A_2/r^6, \tag{1}$$

где $A_1, A_2 > 0$, представляющий из себя сумму двух центральных однородных потенциалов разного порядка однородности, и экспоненциально-степенной центральный неоднородный потенциал Слэтера [1]

$$U(r) = \exp(c_1 r) - c_2/r^6, \tag{2}$$

где $c_1 < 0$, $c_2 > 0$, который является суммой изначально неоднородного (экспоненциального) и однородного степенного потенциалов. Эти потенциалы, как и любые другие суммы, даже только однородных потенциалов, но разной степени однородности в принципе не могут оказаться однородными же потенциалами по определению понятия однородности функций.

1. Получение связи между $E_{\text{ar}}(\rho, T)$ и $P_{\text{ar}}(\rho, T)$

Вначале будет получена связь $E_{\text{ar}}(\rho, T)$ и $P_{\text{ar}}(\rho, T)$ тела при его произвольном сжатии с $E_{\text{sh}}(\rho)$ и $P_{\text{sh}}(\rho)$, полученным при его опытном ударном сжатии. Само тело пока не конкретизируется своим затравочным потенциалом. Искомую связь можно получить, например, в широко используемом приближении Ми–Грюнайзена [2–3]:

$$P(V, T) - P_{\text{co}}(V) = \Gamma(V)[E(V, T) - E_{\text{co}}(V)]/V \to P_t(V, T) = \Gamma(V) E_t(V, T)/V. \tag{3}$$

Здесь коэффициент Грюнайзена $\Gamma(V)$ записан так, как это принято писать во всей периодической физической литературе, т. е. независящим от температуры. К тому же, если еще и допустить, что взаимодействие имеет только центральный характер (а именно таким допущением в основном и пользуются, так как учет тензорных сил неоправданно усложняет данное рассмотрение), то, как это показал (еще в начале прошлого века!) Грюнайзен [4], в случае металлов он вообще не может зависеть от температуры. В случае совершенного газа (идеальный газ с $C = \text{const}$) этот коэффициент есть $\Gamma(V) = \gamma - 1$. Кстати, изначально даже и тепловая энергия в формуле Ми–Грюнайзена бралась без явной зависимости от объема тела, т. е. бралась в виде $E_t(T)$, хотя ее неявная зависимость от объема все же существовала через температуру Дебая, которая неявно зависит от объема.

Для получения искомой связи достаточно рассмотреть два соответствующих УС, следующих из приближения Ми–Грюнайзена (3):

$$P_{\mathrm{ar}}(\rho, T) - P_{\mathrm{co}}(\rho) = \rho\Gamma(\rho)[E_{\mathrm{ar}}(\rho, T) - E_{\mathrm{co}}(\rho)], \quad (4)$$

$$P_{\mathrm{sh}}(\rho) - P_{\mathrm{co}}(\rho) = \rho\Gamma(\rho)[E_{\mathrm{sh}}(\rho) - E_{\mathrm{co}}(\rho)]. \quad (5)$$

В выражении (5) использован случай, когда термодинамическая ударная адиабата (УА)

$$2(E_{\mathrm{sh}} - E_0) = (V_0 - V_{\mathrm{sh}})P_{\mathrm{sh}} \quad (6)$$

твердого тела $P_0 = 0$ задана в виде $P_{\mathrm{sh}} = P_{\mathrm{sh}}(\rho)$, позволяющем потом из (6) получить и ударную энергию $E_{\mathrm{sh}} = E_{\mathrm{sh}}(\rho)$. Теперь, почленно вычитая, например, из первого уравнения второе, можно получить новое соотношение

$$P_{\mathrm{ar}}(\rho, T) - P_{\mathrm{sh}}(\rho) = \rho\Gamma(\rho)[E_{\mathrm{ar}}(\rho, T) - E_{\mathrm{sh}}(\rho)]. \quad (7)$$

Это соотношение, однако, не дает в чистом виде выражения для $P_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$ и $E_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$ по отдельности только через $P_{\mathrm{sh}}(\rho)$ и $E_{\mathrm{sh}}(\rho)$, т.е. из (7) невозможно извлечь отдельные зависимости вида

$$P_{\mathrm{ar}}(\rho, T) = \varphi_1[P_{\mathrm{sh}}(\rho), E_{\mathrm{sh}}(\rho), T]$$

и

$$E_{\mathrm{ar}}(\rho, T) = \varphi_2[P_{\mathrm{sh}}(\rho), E_{\mathrm{sh}}(\rho), T],$$

или тем более еще более удобных для практических целей зависимостей вида

$$P_{\mathrm{ar}}(\rho, T) = f_1[P_{\mathrm{sh}}(\rho), T] \text{ и } E_{\mathrm{ar}}(\rho, T) = f_2[P_{\mathrm{sh}}(\rho), T], \quad (8)$$

поскольку непосредственным ударным результатом является только $P_{\mathrm{sh}}(\rho)$, тогда как ударную энергию $E_{\mathrm{sh}}(\rho)$ нужно еще вычислять из уравнения (6) для УА, используя выражение для $P_{\mathrm{sh}}(\rho)$ (так, найденное выражение для $E_{\mathrm{sh}}(\rho)$ см. ниже).

2. Расщепление связи между $E_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$ и $P_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$

Для расщепления связи (7) необходима еще одна, независимая от (7) связь между искомыми $P_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$ и $E_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$. Для этого можно использовать ТВ [2]:

$$3P_{\mathrm{ar}}(V, T)V = \Big[3(\gamma - 1) - \sum_n n\Big]E_{\mathrm{kin}}(V, T) + E_{\mathrm{ar}}(V, T)\sum_n n \equiv \kappa E_{\mathrm{kin}} + E_{\mathrm{ar}}\sum_n n, \quad (9)$$

имеющая место для центральных, отличных от нуля затравочных потенциалов вида

$$U(r) = \sum_n A_n/r^n \equiv \sum_n U_n(r). \quad (10)$$

Параметр $\sum_n n$ в ТВ (9) связан с выбором конкретного потенциала. Так, например, для кулоновского (или ньютоновского) потенциала (они однородные функции порядка минус единица) он равен единице, а для однородного потенциала $(-n)$-го порядка (это может быть сумма потенциалов отталкивания и притяжения порядков $(-n)$, либо же только отталкивающий потенциал $U(r) \propto 1/r^n$), т.е. когда он удовлетворяет уравнению Эйлера $\mathbf{r}\partial\mathbf{U}(\mathbf{r})/\partial\mathbf{r} = -n\mathbf{U}(\mathbf{r})$, параметр $\sum_n n \to n$, и тогда ТВ (9) примет свою точную форму:

$$3P_{\mathrm{ar}}(V, T)V = (2 - n)E_{\mathrm{kin}}(V, T) + nE_{\mathrm{ar}}(V, T)\,\|_{\gamma=5/3}, \quad (11)$$

хотя формально-математически и ТВ (9) является точным соотношением. Для неоднородного потенциала (1) Леннарда–Джонса этот параметр $\sum_n n$ равен 18, хотя эффективный порядок его однородности есть $\big(-\sum_n n\big) = -18$. Ниже, однако, в численных расчетах используется лишь отталкивающий, некулоновский $(n > 1)$, однородный потенциал типа $U(r) = A/r^n$. $A > 0$, где показатель степени $n = 10, 15, 18, 20, 22, 24, 26$, и тогда параметр $\sum_n n$ в формуле (9) равен просто n.

Выражение (11) (или (9)) для ТВ все еще не позволяет расщепить E_{ar} и P_{ar} в общем случае из-за присутствия там $E_{\mathrm{kin}}(V, T)$, явный вид которого неизвестен.

В классическом же случае явный вид E_{kin} известен, например, средняя кинетическая энергия одного моля вещества, как известно, есть

$$E_{\mathrm{kin}}(T) = RT/(\gamma - 1) = (3/2)RT\big|_{\gamma=5/3}. \quad (12)$$

Итак, в случае классической статистики не только возможно расщепление E_{ar} и P_{ar}, но, что более важно, даже и ТВ (9), и ТВ (11) позволяют замкнуть (так как теперь E_{kin} не зависит от объема тела) еще и основное термодинамическое соотношение

$$T(\partial P/\partial T)_V = (\partial E/\partial V)_T + P(V, T) \quad (13)$$

и получить отдельные замкнутые уравнения для энергии $E(V, T)$ и давления $P(V, T)$ [2].

Это возможно даже и в том случае, когда известен явный вид $E_{\mathrm{kin}}(V, T)$, пусть даже зависящий от объема. Однако соотношение (13) в настоящей работе вообще не используется.

3. Получение явных зависимостей для $E_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$ и $P_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$

Теперь значения $E_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$ и $P_{\mathrm{ar}}(\rho, T)$ при произвольном сжатии тела до тех плотностей ρ, для которых даны $E_{\mathrm{sh}}(\rho)$ и $P_{\mathrm{sh}}(\rho)$, будут выражены из ТВ (9), но с учетом выражения для кинетической энергии (12), т.е. с использованием классической статистики. Так, выражение для энергии $E(\rho, T) \equiv E_{\text{ar}}(\rho, T)$, согласно ТВ (10), примет такой вид

$$E_{\text{ar}}(V, T) = (1/n)[3P_{\text{ar}}(V, T)V - (2-n)(3/2)RT]\big|_{\gamma=5/3}. \tag{14}$$

С помощью этого выражения можно из формулы (7) исключить энергию $E_{\text{ar}}(\rho, T)$ и, следовательно, получить явное выражение для давления тела $P_{\text{ar}}(\rho, T)$:

$$P_{\text{ar}}(\rho, T) = \frac{n}{n - 3\Gamma(\rho)}\left[\frac{2-(\sigma-1)\Gamma(\rho)}{2}P_{\text{sh}}(\rho) + \left(\frac{n-2}{n}E_{\text{kin}} - E_0\right)\rho\Gamma\right]_{\gamma=5/3}. \tag{15}$$

В выражении (15) уже исключена и ударная энергия $E_{\text{sh}}(\rho)$ тела:

$$E_{\text{sh}}(\rho) = ((\sigma-1)/2\rho)P_{\text{sh}}(\rho) + E_0. \tag{16}$$

Выражение (16) получено из уравнения для УА при заданной функции $P_{\text{sh}}(\rho)$.

Таким образом, давление тела $P_{\text{ar}}(\rho, T)$ в классической статистике выражено через некую функцию его плотности, взятую из опыта, и температуры, причем последняя входит (явным образом) в это выражение для давления линейно.

Аналогичную выражению (15) связь для энергии тела при произвольном его сжатии с ударным давлением можно получить, если выражение (15) подставить в (14):

$$E_{\text{ar}}(\rho, T) = \frac{3}{n - 3\Gamma(\rho)} \times \left[\frac{2-(\sigma-1)\Gamma(\rho)}{2\rho}P_{\text{sh}}(\rho) + \frac{n-2}{3}E_{\text{kin}} - \Gamma(\rho)E_0\right]_{\gamma=5/3}. \tag{17}$$

При $\sigma = 1$ из выражения (15) (или (17)) получается для начальной энергии E_0 тела значение, зависящее от порядка n однородности затравочного потенциала $U_n(r)$:

$$E_0 = \frac{\sum\limits_n n - 3(\gamma-1)}{(\gamma-1)\sum\limits_n n}RT_0 = \frac{n-2}{n}\,\frac{3}{2}RT_0\Big|_{\sum n=n,\gamma=5/3} \equiv \frac{n-2}{n}E_{\text{kin}}(T_0), \tag{18}$$

поскольку при этом должно быть $P_{\text{sh}}(\sigma = 1) = P_{\text{ar}}(\sigma = 1) = P_0 = 0$.

Формулы (15) и (17) с независимыми ρ и T (они взяты с потенциалом (10), но их можно брать и с любым подходящим потенциалом, заменив должным образом при этом параметр $\sum\limits_n n$ на соответствующий новому потенциалу параметр) пригодны для вычисления искомых функций $P_{\text{ar}}(\rho, T)$ и $E_{\text{ar}}(\rho, T)$ при произвольном сжатии классического тела, если известно значение ударного давления $P_{\text{sh}}(\rho)$ для различных значений плотности ρ.

Итак, используя опытные УА разных металлов и формулы (15) и (17), можно построить аналитические зависимости $P_{\text{ar}}(\rho, T)$, $E_{\text{ar}}(\rho, T)$ для их произвольных (неударных) сжатий тела в классической статистике, в приближении Ми–Грюнайзена.

4. Некоторые численные расчеты с однородным отталкивающим потенциалом

Во-первых, в этих расчетах будет использована ТВ (11). Во-вторых, эта теорема записана в системе единиц СИ, где единицей количества вещества является моль. В прикладных же вычислениях используется не количество вещества, а его масса — кг. Масса же моля вещества в граммах численно равна его относительной молекулярной массе. Тогда удобно ввести новую постоянную $\overline{R} = (8.31/A)$ J/gK, где A и есть относительная молекулярная его масса (массовое число), а соотношение (11) для ТВ записать в виде, удобном для численных расчетов, т.е. в фактически используемых на практике единицах давления — гигапаскали 1 GPa $\equiv 10^9$ Pa, единицах удельной внутренней энергии — kJ/g, единицах плотности — g/cm^3. Таким образом, теперь ТВ (11) примет вид

$$\left(\frac{\overline{P}_{\text{ar}}}{\overline{\rho}}\right)\left[\frac{\text{kJ}}{\text{g}}\right] = \left[10^{-3}\,\frac{(\gamma-1)-(n/3)}{\gamma-1}\overline{R}T + \left(\frac{n}{3}\right)\overline{E}_{\text{ar}}\right] = \left[\left(\frac{n}{3}\right)\overline{E}_{\text{ar}} - 10^{-3}\,\frac{(n-2)\overline{R}T}{2}\right]_{\gamma=5/3}. \tag{19}$$

В это выражение для ТВ давление $\overline{P}$ нужно подставлять в GPa, плотность $\overline{\rho}$ — в g/cm^3, а постоянная $\overline{R} \equiv R/A$, и поэтому

$$[\overline{R}]\left(\frac{J}{gK}\right) = 10^{-3}\,\frac{\text{kJ}}{\text{g}}, \quad \gamma \equiv C_P/C_V = 5/3; 7/5, \ldots.$$

В случае ТВ (19) формулы (15) и (17) выглядят так:

$$E_0 \equiv \frac{n-2}{n}E_{\text{kin}}(T_0)\,\text{J/mol} = 10^{-3}\,\frac{n-2}{n}E_{\text{kin}}(T_0)\,\text{kJ/g},$$

$$\overline{R} = R/A.$$

$$P_{\text{ar}}(\sigma, T) = \frac{n}{n-3\Gamma}\left[\frac{2-(\sigma-1)\Gamma}{2}P_{\text{sh}}(\sigma) + 10^{-3}\left(\frac{n-2}{n}E_{\text{kin}} - E_0\right)\rho\Gamma\right]_{\gamma=5/3}\text{GPa}. \tag{20}$$

$$E_{\text{ar}}(\rho, T) = \frac{3}{n-3\Gamma(\rho)}\left[\frac{2-(\sigma-1)\Gamma(\rho)}{2\rho}P_{\text{sh}}(\rho) + 10^{-3}\left(\frac{n-2}{3}E_{\text{kin}} - \Gamma E_0\right)\right]_{\gamma=5/3}\text{kJ/g}, \tag{21}$$

$$E_{\text{sh}}(\rho) = ((\sigma-1)/2\rho)P_{\text{sh}}(\rho) + E_0. \tag{22}$$

Именно формулы (20) и (21) и использовались во всех численных расчетах.

5. Ударное сжатие твердого и жидкого молекулярного водорода

Здесь будут использованы числовые значения $P_{\text{sh}}(\rho)$ для твердого молекулярного водорода H_2 (берется молекула H_2 протия ${}_1H^1$ в обозначениях ${}_ZD^A$, где Z — атомный номер химического элемента D, A — его массовое число), приведенные в работе [5,6].

В работе [5] использовался твердый молекулярный водород с начальной температурой $T_0 < 19\,\text{K}$ и начальной плотностью $\rho_0 = 0.088\,\text{g}(\text{cm}^{-3})$. Тогда для молярного объема такого водорода получается значение

$$V_0 = 10^6(M/\rho_0)\,\text{cm}^3\text{N}^{-1} = 10^{-6}(2/0.088)\,\text{N}^{-1}$$
$$\approx 2.27 \cdot 10^{-5}\,\text{cm}^3\text{N}^{-1} = 2.27 \cdot 10^{-11}\,\text{m}^3\text{N}^{-1}. \quad (23)$$

В [5] ударные давления доходили до 65 GPa.

В работе [6] ударному сжатию подвергался жидкий молекулярный водород до давлений порядка 1.4 Mbar.

6. Графическое представление результатов численных расчетов

Цель численных расчетов в настоящей работе состояла в том, чтобы выявить степень соответствия давлений и энергий, вычисленных по формулам (20) и (21) соответственно, их опытным значениям. С этой целью мы решили построить с помощью этих же формул (20), (21) и формулы (6) теоретическую термодинамическую УА данного тела и потом наложить на нее его же опытную УА $P_{\text{sh}}^{\text{exp}} = P(\sigma)$. Степень близости этих УА друг другу позволила бы оценить практическую приемлемость формул (20) и (21) для давления и внутренней энергии. Такой тест для проверки $P = P(V, T)$ и $E = E(V, T)$, полученных каким-либо аналитическим или любым иным путем, был предложен одним из авторов (С.М.Ф.) в работе [2] еще в 1998 г.

Для этой цели с помощью формул (20), (21) и УА (6), переписанной в виде

$$P_{\text{ar}} - \frac{2\rho}{\sigma - 1}(E_{\text{ar}} - E_0) = 0;$$

$$E_0 = \frac{n-2}{n}\,\frac{3}{2}RT_0,\ \ \overline{E}_{\text{kin}} \equiv \frac{n-2}{n}E_{\text{kin}},\ \ E_{\text{kin}} = \frac{3}{2}RT, \quad (24)$$

была получена аналитическая связь $f(\sigma, t) = 0$ температуры тела t с параметром σ вдоль теоретически построенной УА ($a \equiv [2 - (\sigma - 1)\Gamma]/2$):

$$f(\sigma, t) = \frac{n}{n - 3\Gamma}[aP_{\text{sh}} + \rho\Gamma(\overline{E}_{\text{kin}} - E_0)]$$
$$- \frac{2\rho}{\sigma - 1}\left[\frac{3}{n - 3\Gamma}\left(\frac{a}{\rho}P_{\text{sh}} + \frac{n}{3}\overline{E}_{\text{kin}} - \Gamma E_0\right)\right] = 0. \quad (25)$$

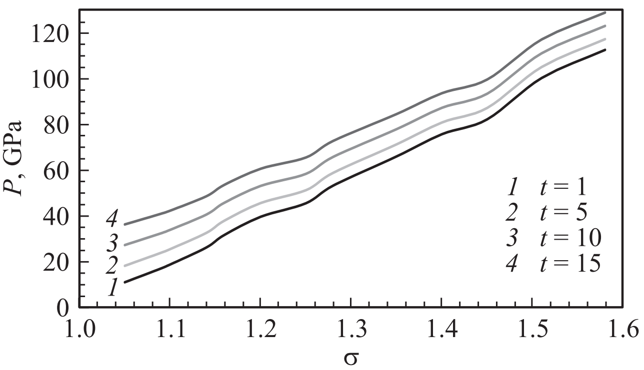

Рис. 1. Изотермы алюминия $A = 27$, $\Gamma_0 = 2.18$, $\rho_0 = 2.828$ для $n = 10$.

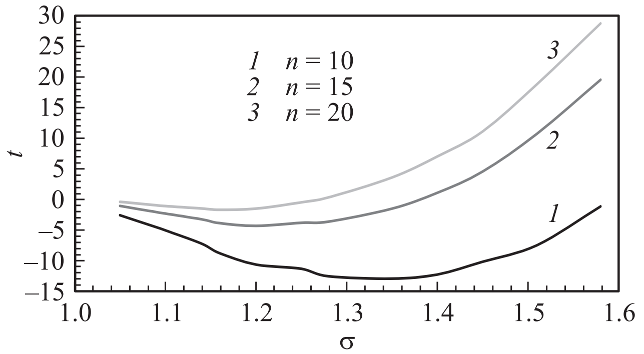

Рис. 2. Алюминий $A = 27$, $\Gamma_0 = 2.18$, $\rho_0 = 2.828\,\text{g/cm}^3$. Зависимость $t(\sigma)$ вдоль теоретической УА.

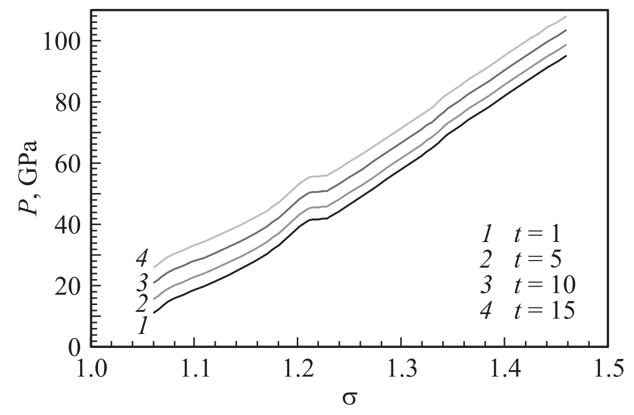

Рис. 3. Изотермы бериллия $A = 9$, $\Gamma_0 = 1.16$, $\rho_0 = 1.850$ для $n = 10$.

Явно эта связь температуры и сжатия σ тела вдоль теоретической УА (25) имеет вид

$$t_{\text{sh}}^{\text{theor}}(\sigma, n) - 1 = \frac{1}{3\overline{R}T_0\rho_0}\,\frac{n(\sigma - 1) - 6}{(n-2)\sigma}\,P_{\text{sh}}^{\text{exp}}(\sigma). \quad (26)$$

Если эту связь подставить в выражение (20) для давления тела, то получится УА, соответствующая аналитически найденным термическому и калорическому УС, т.е. получится теоретическая УА. Подстановка выражения (26) в формулу (20) после довольно длинных, но вполне очевидных выкладок приводит к весьма любопытному результату:

$$P_{\text{sh}}^{\text{theor}}[\sigma, t_{\text{sh}}^{\text{theor}}(\sigma; n)] \equiv P_{\text{sh}}^{\text{theor}}(\sigma; n) = P_{\text{sh}}^{\text{exp}}(\sigma), \qquad (27)$$

т. е. теоретическая УА даже аналитически (а не лишь графически) совпадает с опытной УА, которая (опытная УА) явным образом вообще не зависит от каких-либо показателей степени однородности фактически действующего между структурными единицами тела потенциала, который можно считать однородным лишь в каком-то приближении.

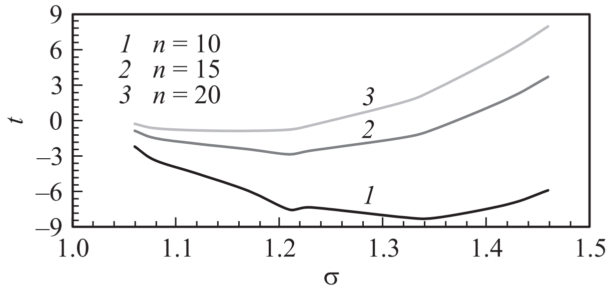

Рис. 4. Бериллий $A = 9$, $\Gamma_0 = 1.16$, $\rho_0 = 1.850$. Зависимость $t(\sigma)$ вдоль теоретической УА.

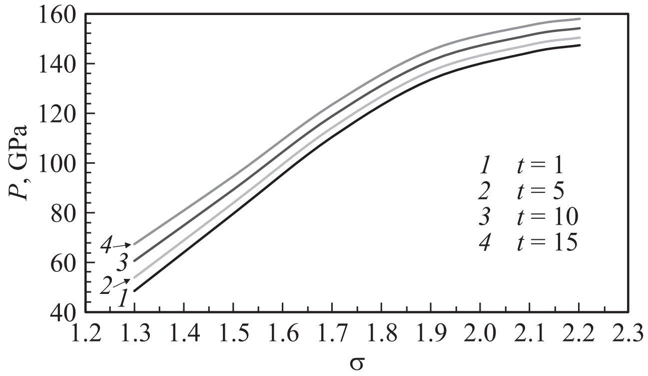

Рис. 5. Изотермы свинца $A = 207$, $\Gamma_0 = 2.84$, $\rho_0 = 11.34$ для $n = 10$.

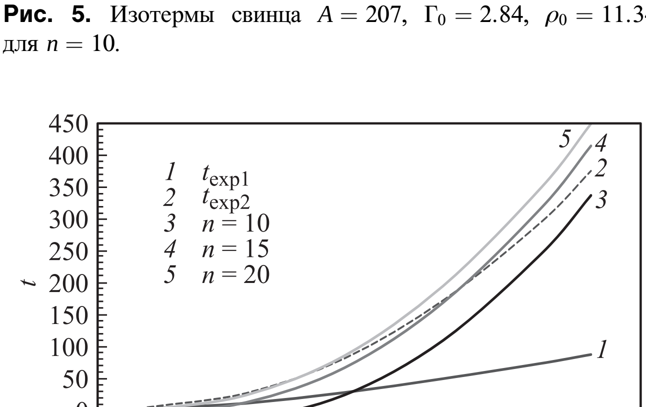

Рис. 6. Свинец $A = 207$, $\Gamma_0 = 2.84$, $\rho_0 = 11.34$. Зависимость $t(\sigma)$ вдоль теоретической УА.

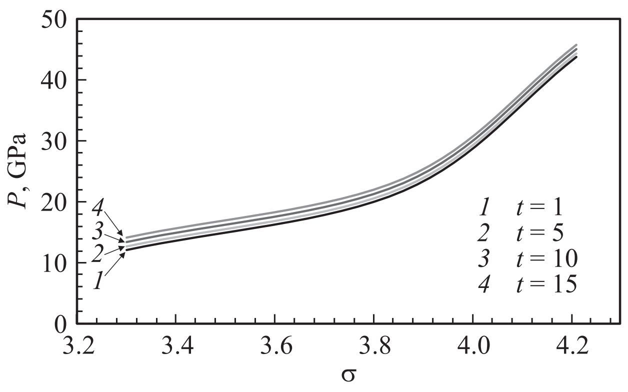

Рис. 7. Изотермы молекулярного твердого протия $A = 2$, $\Gamma_0 = 1$, $\rho_0 = 0.088$ для $n = 10$.

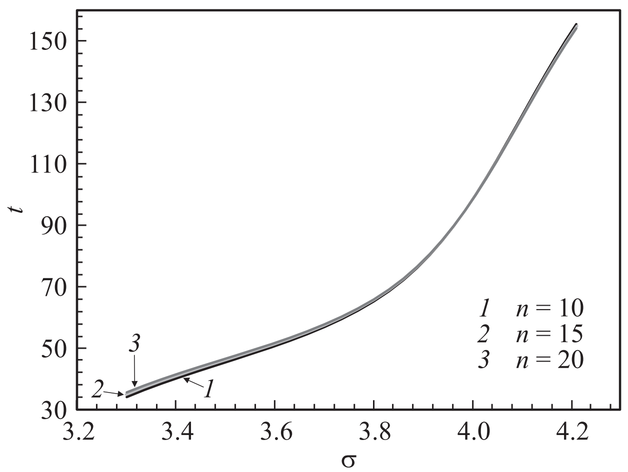

Рис. 8. Молекулярный твердый протий $A = 2$, $\Gamma_0 = 1$, $\rho_0 = 0.088$. Зависимость $t(\sigma)$ вдоль теоретической УА.

Ниже в численных расчетах, как и всюду выше, используется приближение $\rho\Gamma(\rho) \approx \rho_0\Gamma_0$ [7], т. е. $\Gamma(\rho) \approx \Gamma_0/\sigma$, так как оно вносит ошибку того же порядка, которую обычно имеют опытные данные [9], относящиеся к их значениям по $P_{\text{sh}}^{\text{exp}}$.

Построены изотермы алюминия, бериллия (по данным [8]), свинца (по [9]) и твердого водорода (по [5]), а также зависимости температуры вдоль теоретической УА у всех этих элементов. Поскольку вид изотерм для $n = 10$, 15, 20 качественно совпадает для всех рассмотренных случаев, то все изотермы приводятся только для $n = 10$.

На опытную УА свинца [9] наложены теоретические УА для разных степеней однородности затравочного потенциала $n = 10$, 15, 20.

Заключение

Основным критерием приемлемости аналитически полученных выражений для энергии и давления тела в классической статистике, в смысле хотя бы качественного отражения его фактического поведения при сжатии, как и всегда, должно быть качественное согласие теоретически построенной УА с его опытной УА. В данном подходе они даже аналитически совпадают, что затрудняет однозначное толкование этого результата. Это, по-видимому, связано со спецификой самой схемы получения аналитических выражений для энергии и давления тела: вместо основы $P_{\text{sh}}^{\text{exp}}(\rho)$ в этой схеме можно взять и любую другую основу, например $f(\sigma)$, и тогда теоретическая УА $P_{\text{sh}}^{\text{theor}}(\rho, n)$ совпадала бы с $f(\sigma)$.

В связи с этим возможно было бы интересно рассмотреть эту схему для более общего случая тела, а не только твердого тела, и тогда наряду с начальной энергией E_0 в эти выражения входило бы еще и начальное давление P_0, но тогда эта общая схема позволяла бы переход к классическому идеальному газу. Возможно, это стоит сделать в дальнейшем.

Список литературы

[1] *Фейнман Р.* Статистическая механика. М.: Мир, 1978.
[2] *Сарры М.Ф.* // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 10. С. 1.
[3] *Жирифалько Л.* Статистическая физика твердого тела. М.: Мир, 1973.
[4] *Зейтц Ф.* Современная теория твердого тела. ГИТТЛ, 1949.
[5] *Трунин Р.Ф., Борисков Г.В., Белов С.И.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 2005. Т. 82. Вып. 5. С. 317.
[6] *Швец В.Т., Власенко А.С., Буханенко А.Д.* // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 86. Вып. 8. С. 625.
[7] *Селиванов В.В., Савельев В.С., Сысоев Н.Н.* Ударные и детонационные волны. М.: Изд-во МГУ, 1990.
[8] *Dabos-Seignon S.* etc. // J. Allois and Compaunds. 1993. Vol. 190. P. 237.
[9] *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.