

О р д е н а   Л е н и н а  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
им. М.В. Келдыша  
Р о с с и й с к о й   а к а д е м и и   н а у к

А.С. Грушин, А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков

ПОСТРОЕНИЕ ШИРОКОДИАПАЗОННОГО  
УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВОЛЬФРАМА

Москва

# ПОСТРОЕНИЕ ШИРОКОДИАПАЗОННОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВОЛЬФРАМА

*А.С. Грушин, А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков*

Препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН

В работе описан метод построения широкодиапазонного уравнения состояния (УРС) вещества путем "сшивки" локальных уравнений состояния, построенных на основе теоретических и полуэмпирических моделей, с помощью "лоскутов" Эрмита. В качестве примера построено широкодиапазонное уравнение состояния вольфрама. Проведено сравнение полученного УРС с известными экспериментальными и теоретическими данными, сделаны выводы о применимости предложенного алгоритма для создания универсального метода построения широкодиапазонных УРС произвольных веществ. В качестве базовой модели была использована модель Хартри-Фока-Слэтера, которая дополнялась данными по моделям Томаса-Ферми, Саха и Quotidian Equation of State.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты N 02-01-01078 и N 05-01-00682).

# THE CONSTRUCTION OF WIDE-RANGE EQUATION OF STATE OF TUNGSTEN

*A.S. Grushin, A.F. Nikiforov, V.G. Novikov*

Preprint of The Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS

Construction of a wide-range equation of state (EOS) by using the interpolation between local EOS, built on the basis of well known theoretical and semi-empirical models, is considered. The interpolation uses the sewing of surfaces with the aid of Hermit patches. As an example, the method is applied for the construction of the wide-range EOS of tungsten. The comparison of the obtained EOS with known experimental and theoretical data is made. Finally, the conclusion on applicability of the method to the construction of wide-range equation of state for arbitrary substance is discussed. The Hartree-Fock-Slater model was used as the basic model, which was supplemented by Thomas-Fermi model, Saha model and Quotidian Equation of State.

The work was partially supported by RFBR Grants N 02-01-01078 and N 05-01-00682.

# Содержание

<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>1. Построение широкодиапазонных уравнений состояния.</b>	
<b>Краткое описание используемых моделей</b>	<b>5</b>
1.1 Общая постановка задачи . . . . .	5
1.2 Модель Томаса-Ферми . . . . .	6
1.3 Модель Саха . . . . .	7
1.4 Модель Хартри-Фока-Слэтера . . . . .	8
1.5 Полуэмпирическая модель QEOS . . . . .	9
<b>2. Метод сшивки</b>	<b>10</b>
2.1 Кривые и поверхности Эрмита . . . . .	11
2.2 Алгоритм сшивания . . . . .	15
<b>3. Исследование широкодиапазонного УРС вольфрама</b>	<b>21</b>
3.1 Давление, энергия, теплоемкость и скорость звука. Коэффициент Грюнайзена . . . . .	21
3.2 Термодинамическая согласованность полученного уравнения состояния . . . . .	24
3.3 Ударные адиабаты и их сравнение с экспериментом . . . . .	25
<b>Список литературы</b>	<b>28</b>

## Введение

Во многих областях современной физики исследователям все чаще приходится обращаться к уравнению состояния (УРС) вещества, заданному на широких интервалах температуры и плотности. В качестве примера востребованности широкодиапазонного УРС, приведем высокоточный импульсный разряд (Z-пинч) для получения мощного рентгеновского излучения [1]. В эксперименте берется плотный пучок тонких вольфрамовых проволочек, находящихся при комнатной температуре, и через него пропускается электрический ток в десятки миллионов ампер. В результате быстрого нагрева получается высокотемпературная плазма, которая благодаря параллельным токам, проходящим через нее, сжимается до высоких плотностей и дает рентгеновское излучение. Для моделирования такого эксперимента требуется наличие УРС, описывающего вещество от температур  $T$  порядка  $10^2$  К ( $10^{-2}$  эВ) и плотностей  $\rho \sim 20$  г/см<sup>3</sup> до температур  $T \sim 10^7$  К (1 кэВ) и плотностей  $\rho \sim 10^{-4}$  г/см<sup>3</sup>. В других задачах диапазоны изменения температуры и плотности могут достигать еще больших значений.

Таким образом, перед исследователями стоит довольно сложная задача построения уравнений состояния, определенных на больших интервалах температуры и плотности. Общий подход, обладающий универсальностью и надежностью, до сих пор не разработан, несмотря на то, что для ряда веществ построены достаточно надежные широкодиапазонные УРС, обладающие хорошей согласованностью с экспериментом и пригодные для последующих, например, газодинамических расчетов. Обычно за основу берут полуэмпирические зависимости, которые экстраполируют на известные асимптотики при высоких температурах и плотностях. Здесь следует особо отметить одну из первых удачных интерполяций модели Томаса–Ферми на полуэмпирический УРС, сделанную Г.Е. Клинишовым, а также работы С.Б. Кормера, Л.В. Альтшулера и А.В. Бушмана [2–6]. Основным недостатком такого подхода является то, что вклад процессов многократной ионизации здесь, как правило, игнорируется. Учет ионизации проведен в квазизонной интерполяции модели Саха на модель Томаса–Ферми с поправками [7] (см. также [8] и другие работы, использующие сплайн-аппроксимацию [2] или различные аналитические аппроксимации [9]).

Несмотря на большое количество построенных широкодиапазонных уравнений состояния различных веществ, каждый раз при построении нового УРС требуется большая кропотливая ручная работа. Поэтому велика потребность в разработке автоматизированных средств построения широкодиапазонных УРС на основе апробированных моделей вещества и специальных программных средств аппроксимации. Данная работа представляет собой попытку сделать шаг именно в этом направлении.

Авторы полагают, что в качестве основной модели при построении широкодиапазонного УРС следует взять модифицированную модель Хартри–Фока–Слэтера (ХФС) [10], которая переходит в модель Саха при малых плотностях и в модель Томаса–Ферми (ТФ) при больших плотностях. Вместе с тем проводить расчеты непосредственно по модели ХФС при очень малых или при очень больших плотностях представляется нецелесообразным, т.к. в первом случае требуются подробные сетки для волновых функций электронов, а во втором случае довольно сложно проводить расчет зонной структуры спектра, состоящего из перекрытых зон. Поэтому модель ХФС удобно дополнить моделями Саха и ТФ. При низких температурах наиболее удобным представляется использование универсального полуэмпирического уравнения состояния QEOS [11].

В результате был разработан метод построения широкодиапазонных уравнений состояния путем сшивания локальных УРС с помощью так называемых "лоскутов" Эрмита через области, в которых использованные модели недостоверно описывают вещество. В силу того, что выбранные методики являются довольно общими и не привязаны к какому-то конкретному веществу, есть основания полагать, что предложенный в данной работе метод удастся автоматизировать и представить в виде единой программной оболочки для построения широкодиапазонных УРС. В качестве примера применения предложенного метода было построено уравнение состояния вольфрама на основе модели ХФС с использованием данных по моделям Саха, ТФ и QEOS. Полученный широкодиапазонный УРС находится в хорошем согласии с известными экспериментальными данными по различным механическим и термодинамическим свойствам вольфрама, хорошо описывает экспериментальные ударные адиабаты сжатия сплошного и пористого вольфрама, обеспечивает довольно точный выход на различные асимптотические значения и обладает, в среднем, малой термодинамической рассогласованностью. Предложенный метод можно применять для построения широкодиапазонных УРС различных веществ.

# 1. Построение широкодиапазонных уравнений состояния. Краткое описание используемых моделей

## 1.1 Общая постановка задачи

При построении УРС вольфрама в качестве опорных моделей используем:

1. Модель Хартри-Фока-Слэтера в области высоких температур;
2. Модель Томаса-Ферми в области высоких плотностей;
3. Модель Саха в области низких температур и малых плотностей;
4. Полуэмпирическая модель QEOS (Quotidian Equation of State) в области низких температур и высоких плотностей (твердая и жидкая фазы вещества).

В нашем распоряжении имеются также экспериментальные данные по ударному сжатию вольфрама и холодные кривые давления и энергии, заданные на необходимом диапазоне плотностей.

Практически все существующие модели, в том числе и перечисленные выше, имеют ограниченную область применимости, поэтому необходимо разработать метод, позволяющий строить широкодиапазонные УРС для веществ на основе выбранных моделей с интерполяцией через области, где эти модели перестают достоверно описывать вещество. Метод должен обладать определенной степенью универсальности и автономности. Перед тем, как приступить к описанию метода интерполяции, приведем формулы для давления и энергии по выбранным моделям вещества.

## 1.2 Модель Томаса-Ферми

В основе модели Томаса-Ферми лежит использование статистики Ферми-Дирака и квазиклассического приближения для электронов, т.е. электроны считаются непрерывно распределенными в фазовом пространстве в соответствии со статистикой Ферми-Дирака. Формулы для давления  $P_e$  и энергии  $E_e$  электронов в соответствии с данной моделью имеют вид [10]

$$\begin{aligned}
 P_e &= \frac{2\sqrt{2}\theta^{5/2}}{3\pi^2} I_{3/2} \left( \frac{\mu}{\theta} \right), \\
 E_e &= \frac{8\sqrt{2}\theta^{3/2}}{3\pi} \left( \theta r_0^3 I_{3/2} \left( \frac{\mu}{\theta} \right) - \frac{3}{2} \int_0^{r_0} r^2 I_{3/2} \left( \frac{V(r) + \mu}{\theta} \right) dr \right),
 \end{aligned}
 \tag{1.2.1}$$

где  $I_{3/2}(x)$  – функция Ферми-Дирака,  $\theta$  – температура,  $\mu$  – химический потенциал,  $V(r)$  – самосогласованный потенциал по модели Томаса-Ферми (все величины, где это особо не указано, приведены в атомных единицах).

Для получения полных давления и энергии, необходимо учесть давление и кинетическую энергию ядер (ионных остовов), которые при высоких температурах обычно рассматриваются как идеальный газ:

$$P = P_e + \frac{\theta}{v},$$

$$E = E_e + \frac{3}{2}\theta - E_0,$$
(1.2.2)

где  $E_0$  – энергия свободного атома по модели ТФ,  $v = \frac{4}{3}\pi r_0^3$  – объем атомной ячейки,  $r_0 = 1.388 \left(\frac{A}{\rho}\right)^{1/3}$ ,  $\rho$  – плотность вещества в г/см<sup>3</sup>,  $A$  – атомный вес. Для перехода от атомных единиц к общепринятым необходимо давление умножить на  $2.942 \cdot 10^4$  ГПа, а энергию на  $2.626 \cdot 10^3/A$  кДж/г. Температура  $T$  в эВ связана с  $\theta$  соотношением  $T = 27.212 \cdot \theta$  эВ.

В данной работе модель ТФ использовалась в области максимальных плотностей и температур, а также для получения кривых холодного сжатия.

### 1.3 Модель Саха

Данная модель обычно используется в области малых плотностей, так как в этой области вещество находится в состоянии близком к идеальной равновесной плазме. Поэтому для вычисления термодинамических функций можно использовать модель ионизационного равновесия, в соответствии с которой термодинамические функции вещества вычисляются по формулам идеального бoльцмановского газа с учетом затрат на ионизацию:

$$P_t = (Z_0 + 1) \frac{\theta}{v},$$

$$E_t = \frac{3}{2} (Z_0 + 1) \theta + \sum_{js} x_{js} (E_{js} - E_{00}),$$
(1.3.1)

где  $Z_0$  – средний заряд иона:  $Z_0 = \sum j x_{js}$ ;  $x_{js}$  и  $E_{js}$  – концентрации и энергии ионов с зарядом  $j$  в состоянии  $s$ .

По формулам (1.3.1) находятся тепловые составляющие давления  $P_t = P_t(\rho, T)$  и удельной внутренней энергии  $E_t = E_t(\rho, T)$ . Для нахождения полных давления  $P(\rho, T)$  и удельной внутренней энергии  $E(\rho, T)$  необходимо учесть их соответствующие составляющие при нулевой температуре  $P_c(\rho)$  и  $E_c(\rho)$  (холодные кривые) [10, 12]:

$$P(\rho, T) = P_t(\rho, T) + P_c(\rho),$$

$$E(\rho, T) = E_t(\rho, T) + E_c(\rho).$$
(1.3.2)

## 1.4 Модель Хартри-Фока-Слэтера

Данная модель существенно уточняет модель Томаса-Ферми путем прямого расчета волновых функций электронов. В ней учтены оболочечные, квантовые и обменные эффекты, могут быть внесены релятивистские поправки. По данной модели мы получаем большой термодинамический потенциал, из которого находим давление и энергию [10]:

$$P_e = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \theta^{5/2} \int_{y_0}^{\infty} \frac{y^{3/2} dy}{1 + \exp\left(y - \frac{V(r_0) + \mu}{\theta}\right)} + \int_0^{\rho(r_0)} V_{\text{ex}}(\rho') d\rho' - \rho(r_0) V_{\text{ex}}(\rho(r_0)), \quad (1.4.1)$$

$$E_e = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \theta^{5/2} \int_0^{r_0} r^2 dr \int_{y_0}^{\infty} \frac{y^{3/2} dy}{1 + \exp\left(y - \frac{V(r) + \mu}{\theta}\right)} - 2\pi \int_0^{r_0} \left[ \frac{Z}{r} + V(r) - V_{\text{ex}}(r) \right] \rho(r) r^2 dr + \sum_{\varepsilon_{nl} < \varepsilon_0} N_{nl} \varepsilon_{nl} + 4\pi \int_0^{r_0} V(r) \rho_b(r) r^2 dr - 4\pi \int_0^{r_0} \left[ \int_0^{\rho(r)} V_{\text{ex}}(\rho') d\rho' - \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \int_0^{\rho(r)} V_{\text{ex}}(\rho') d\rho' \right] r^2 dr - E_0, \quad (1.4.2)$$

где  $Z$  – заряд ядра,  $V(r)$  – самосогласованный потенциал по модели ХФС,  $\mu$  – химический потенциал,  $\rho(r)$  – плотность электронов,  $\rho_b(r)$  – плотность связанных электронов,  $\varepsilon_{nl}$ ,  $N_{nl} = \frac{2(2l+1)}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_{nl} - \mu}{\theta}\right)}$  – энергии и числа заполнения уровней  $nl$ ,  $n$  – главное квантовое число,  $l$  – орбитальное квантовое число,  $\varepsilon_0$  – граница непрерывного спектра,  $y_0 = \max[0, (V(r_0) + \varepsilon_0)/\theta]$ ,  $V_{\text{ex}}(\rho)$  – обменный потенциал,  $E_0$  – энергия свободного атома по модели ХФС.

Отметим, что формулы (1.4.1) – (1.4.2) применимы при сравнительно малых плотностях, т.к. в них отсутствуют члены, учитывающие зонную структуру спектра, которая вносит существенный вклад в термодинамические



функции при высоких плотностях [10]. На данный момент учет зонной структуры в модели ХФС находится на стадии разработки и после ее завершения модель ХФС можно будет применять в существенно более широких по плотности областях.

## 1.5 Полуэмпирическая модель QEOS

Эта модель (полное название – Quotidian Equation of State) построена в результате многолетней работы по получению уравнений состояния в банке данных SESAME (Лос Аламосская Национальная Лаборатория, США). Модель QEOS состоит из набора уравнений с минимальным количеством входных данных, что позволяет легко использовать ее для расчетов УРС различных веществ [11]. По данной модели, как и по модели Саха, мы находим тепловые составляющие термодинамических функций, которые выражаются следующими зависимостями:

$$E_t = 3\theta \left( 1 + \frac{u^2}{20} - \frac{u^4}{1680} \right), \quad (1.5.1)$$

$$P_t = \gamma_s \frac{E_t}{v},$$

где  $u = \frac{\theta_D}{\theta}$ ,  $\theta_D$  – температура Дебая,  $\gamma_s$  – коэффициент Грюнайзена. Величины  $\theta_D$  и  $\gamma_s$  берутся из эксперимента или, если такие данные отсутствуют, описываются по модели Кауэна [11]:

$$\theta_D = \frac{0.0617}{Z + 22} \cdot \frac{\xi^{b+2}}{(1 + \xi)^2}, \quad (1.5.2)$$

$$\gamma_s = b + \frac{2}{1 + \xi},$$

где

$$b = 0.6 \cdot Z^{1/9}, \quad \xi = \frac{9\rho Z^{0.3}}{A}.$$

Здесь  $Z$  – заряд ядра,  $A$  – атомный вес,  $\rho$  – плотность вещества в г/см<sup>3</sup>.

В данной работе модель QEOS использовалась для получения тепловых составляющих давления и удельной внутренней энергии в области низких температур и высоких плотностей для твердой фазы вещества. В области жидкой фазы фактически использовалась интерполяция между твердой и газообразной фазами.

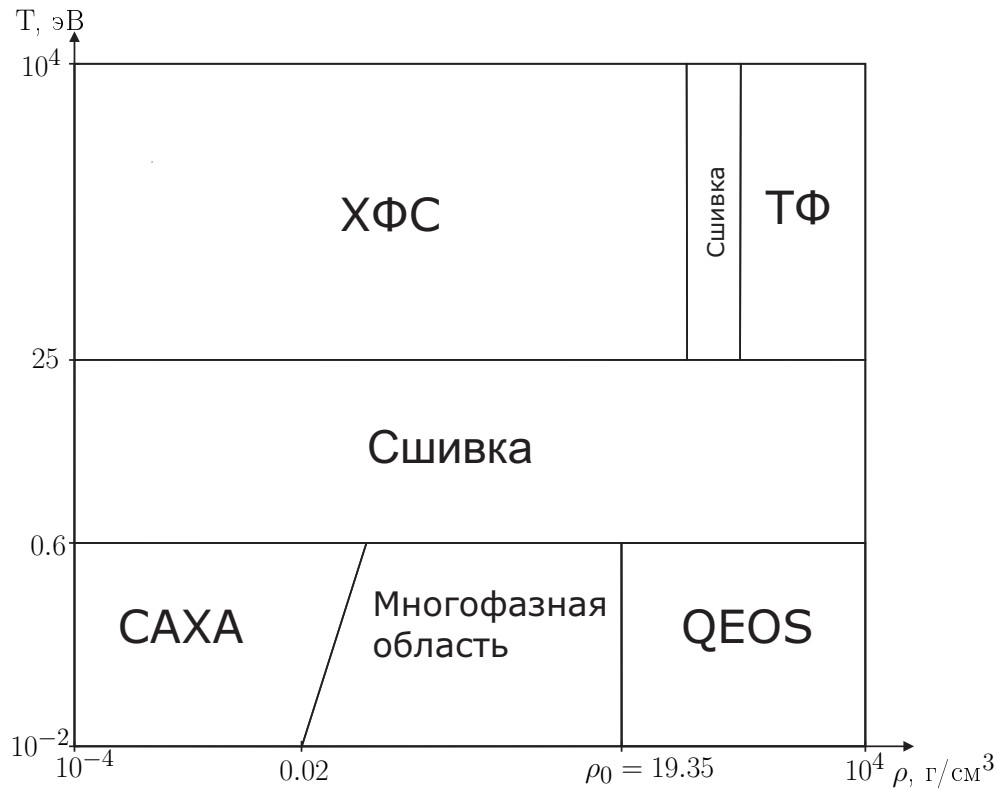


Рис. 1.1. 'Модельная карта' в логарифмическом масштабе

Таким образом, имеется все необходимое для построения локальных УРС. Мы не обсуждаем здесь проблему построения холодных кривых. Предполагается, что холодные кривые для давления и удельной внутренней энергии, заданные на рассматриваемом диапазоне плотностей, термодинамически согласованные и находящиеся в соответствии с экспериментальными данными по ударным адиабатам, каким-то образом получены. В процессе построения широкодиапазонного уравнения состояния по данному методу эти холодные кривые, скорее всего, придется немного подкорректировать, о чем будет сказано в подпункте 2.2.

На Рис. 1.1 обозначено, в каких областях какие модели используются.

## 2. Метод сшивки

Несмотря на большое количество разработанных алгоритмов интерполяции термодинамических функций (в частности, стоит отметить [13]), в данной работе было принято решение использовать методы, применяемые в системах автоматизации проектирования (САПР) и машинной графике (см. например, [13–16]).

Для построения уравнения состояния в широкой области температур и

плотностей  $\left\{ \rho \in [10^{-4}, 10^4] \text{ г/см}^3, T \in [10^{-2}, 10^4] \text{ эВ} \right\}$  полученные по различным моделям поверхности давления  $P(\rho, T)$  и энергии  $E(\rho, T)$  необходимо сшить между собой с выполнением следующих условий:

1. Должна соблюдаться непрерывность самих термодинамических функций и их первых частных производных по обоим аргументам  $\rho$  и  $T$  (гладкость поверхности);
2. Отсутствие, по возможности, так называемых артефактов в построенных поверхностях  $P(\rho, T)$ ,  $E(\rho, T)$  и их первых производных, т.е., например, отсутствие участков резкого возрастания или убывания и т.п.;
3. Знакопостоянство производных  $\frac{\partial E}{\partial T}$  и  $\frac{\partial P}{\partial \rho}$ , что соответствует физическому смыслу этих величин (теплоемкость и квадрат скорости звука);
4. Интерполяция должна удовлетворять условиям термодинамической согласованности (см. далее формулу (2.2.1)).

Для анализа качества аппроксимации нам понадобятся частные производные от исходных и полученных функций. Так как результаты расчетов по моделям вещества обычно представлены в виде таблиц по  $T$  и  $\rho$ , причем, как правило, на логарифмически равномерных сетках, то будем вычислять разностные производные следующим образом:

$$\begin{aligned} \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=\exp\left(\frac{\ln(x_{i+1})+\ln(x_i)}{2}\right)} &= \left. \frac{y}{x} \right|_{x=\exp\left(\frac{\ln(x_{i+1})+\ln(x_i)}{2}\right)} \cdot \frac{d(\ln(y))}{d(\ln(x))} \approx \\ &\approx \left. \frac{y}{x} \right|_{x=\exp\left(\frac{\ln(x_{i+1})+\ln(x_i)}{2}\right)} \cdot \frac{\ln(y_{i+1}) - \ln(y_i)}{\ln(x_{i+1}) - \ln(x_i)}. \end{aligned} \quad (2.0.1)$$

## 2.1 Кривые и поверхности Эрмита

Для сшивания поверхностей наиболее удобными оказались так называемые поверхности (лоскуты) Эрмита [14] по следующим причинам:

1. В процессе построения поверхности явно задается связь с производными интерполируемых функций и обеспечивается их непрерывность;
2. Алгоритм построения достаточно прост и не ресурсоемок;
3. Параметрическая форма задания кривых и поверхностей позволяет корректировать их свойства в области сшивки.

Рассмотрим сначала кривые Эрмита, заданные на отрезке  $[a, b]$ :

$$\begin{aligned} x(t) &= \sum_{m=0}^3 H_3^m(t) P_x^m, \quad t \in [0, 1], \\ y(t) &= \sum_{m=0}^3 H_3^m(t) P_y^m, \quad t \in [0, 1], \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

где  $H_3^m(t)$  – базовые функции Эрмита; величины  $P_{x,y}^m$  удобно представить в виде четырехкомпонентных векторов ( $m = 0, 1, 2, 3$ ):

$$H_3^m(t) = \begin{cases} 2t^3 - 3t^2 + 1, & m = 0, \\ t(t-1)^2, & m = 1, \\ (t-1)t^2, & m = 2, \\ 3t^2 - 2t^3, & m = 3, \end{cases} \quad (2.1.2)$$

$$\vec{P}_x = \{a, (b-a), (b-a), b\}, \quad (2.1.3)$$

$$\vec{P}_y = \left\{ y(a), \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=a} \cdot (b-a), \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=b} \cdot (b-a), y(b) \right\}. \quad (2.1.4)$$

Заданная таким образом функция  $y(x)$  обеспечивает гладкую интерполяцию на отрезке  $[a, b]$ . Отметим, что в стандартный способ построения кривых Эрмита (2.1.1) – (2.1.4) можно внести произвольный параметр, позволяющий управлять некоторыми свойствами кривых, в частности, изменять поведение производных. Вместо (2.1.3)–(2.1.4) полагаем

$$\vec{P}_x = \left\{ a, \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=0}, \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=1}, b \right\}, \quad (2.1.5)$$

$$\vec{P}_y = \left\{ y(a), \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t=0}, \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t=1}, y(b) \right\}. \quad (2.1.6)$$

где  $\frac{dy}{dt}$  и  $\frac{dx}{dt}$  связаны между собой следующими соотношениями:

$$\left. \frac{dy/dt}{dx/dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=a}, \quad (2.1.7)$$

$$\left. \frac{dy/dt}{dx/dt} \right|_{t=1} = \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=b}. \quad (2.1.8)$$

Используя это представление можно изменять параметрическую зависимость производных  $\frac{dx}{dt}$ ,  $\frac{dy}{dt}$  не изменяя исходных данных.

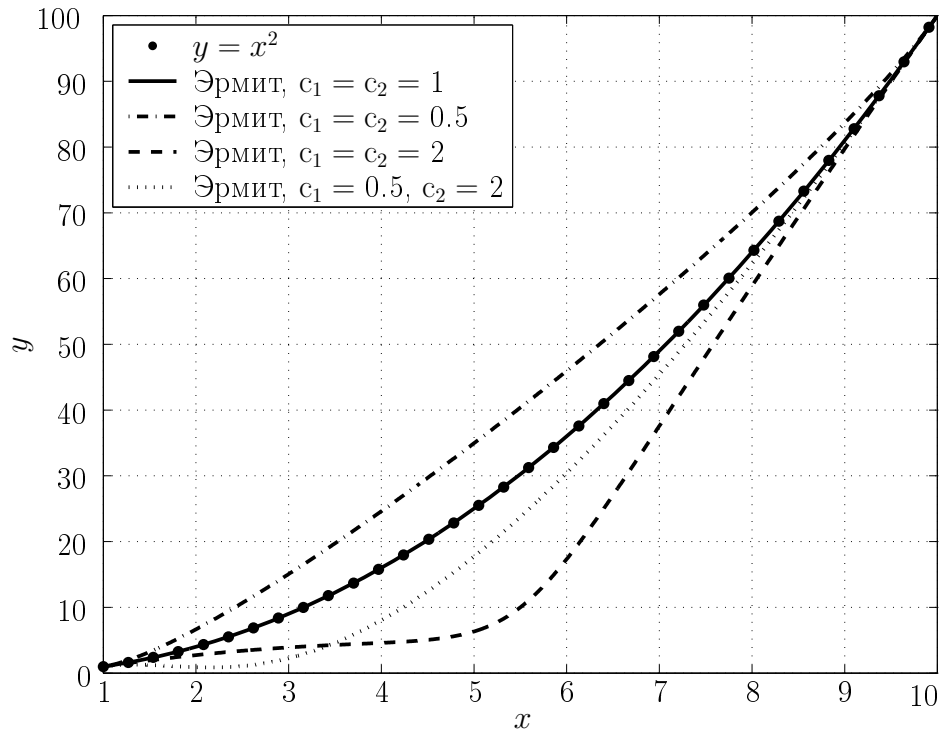


Рис. 2.1. Управление кривой Эрмита

Управление функцией  $y(x)$  и ее производной  $\frac{dy}{dx}$  осуществляется следующим образом: производные  $\frac{dy}{dt}$  и  $\frac{dx}{dt}$  умножаются на некоторую константу, в результате чего получается другая зависимость функции и при этом сохраняется непрерывность первой производной. Константа может быть различной для разных концов отрезка.

Проиллюстрируем это на примере квадратичной функции  $y = x^2$ ,  $x \in [1, 10]$ , используя формулы (2.1.1) – (2.1.4) (сплошная кривая на Рис. 2.1):

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=1} = 2, \quad \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=10} = 200, \quad y|_{x=1} = 1, \quad y|_{x=10} = 100. \quad (2.1.9)$$

Построенный таким образом полином Эрмита практически идентичен исходной квадратичной функции и сливается с ней на графике. Преобразуем формулы (2.1.3) и (2.1.4) к следующему виду

$$\vec{P}_x = \{a, (b - a) c_1, (b - a) c_2, b\}, \quad (2.1.10)$$

$$\vec{P}_y = \left\{ y(a), \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=a} \cdot (b - a) c_1, \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=b} \cdot (b - a) c_2, y(b) \right\}. \quad (2.1.11)$$

Результаты расчетов с различными значениями  $c_1$  и  $c_2$  проиллюстрированы на Рис. 2.1.

Поверхности Эрмита в прямоугольнике  $[a, b] \times [c, d]$  задаются формулами [14] ( $u \in [0, 1]$ ,  $v \in [0, 1]$ ):

$$\left\{ \begin{array}{l} x(u) = \sum_{m=0}^3 H_3^m(u) P_x^m, \\ y(v) = \sum_{k=0}^3 H_3^k(v) P_y^k, \\ z(u, v) = \sum_{m=0}^3 \sum_{k=0}^3 H_3^m(u) H_3^k(v) P_z^{m,k}, \end{array} \right. \quad (2.1.12)$$

где

$$\vec{P}_x = \left\{ a, \left. \frac{dx}{du} \right|_{u=0}, \left. \frac{dx}{du} \right|_{u=1}, b \right\}, \quad (2.1.13)$$

$$\vec{P}_y = \left\{ c, \left. \frac{dy}{dv} \right|_{v=0}, \left. \frac{dy}{dv} \right|_{v=1}, d \right\}, \quad (2.1.14)$$

$$P_z^{m,k} = \begin{bmatrix} z|_{u=0,v=0} & \left. \frac{\partial z}{\partial u} \right|_{u=0,v=0} & \left. \frac{\partial z}{\partial u} \right|_{u=1,v=0} & z|_{u=1,v=0} \\ \left. \frac{\partial z}{\partial v} \right|_{u=0,v=0} & \left. \frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v} \right|_{u=0,v=0} & \left. \frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v} \right|_{u=1,v=0} & \left. \frac{\partial z}{\partial v} \right|_{u=1,v=0} \\ \left. \frac{\partial z}{\partial v} \right|_{u=0,v=1} & \left. \frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v} \right|_{u=0,v=1} & \left. \frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v} \right|_{u=1,v=1} & \left. \frac{\partial z}{\partial v} \right|_{u=1,v=1} \\ z|_{u=0,v=1} & \left. \frac{\partial z}{\partial u} \right|_{u=0,v=1} & \left. \frac{\partial z}{\partial u} \right|_{u=1,v=1} & z|_{u=1,v=1} \end{bmatrix}. \quad (2.1.15)$$

Выполняются условия:

$$\left. \frac{\partial z / \partial u}{dx / du} \right|_{u=0,v=0} = \left. \frac{\partial z}{\partial x} \right|_{x=a,y=c}, \quad \left. \frac{\partial z / \partial v}{dy / dv} \right|_{u=0,v=0} = \left. \frac{\partial z}{\partial y} \right|_{x=a,y=c}, \quad (2.1.16)$$

$$\left. \frac{\partial z / \partial u}{dx / du} \right|_{u=1,v=0} = \left. \frac{\partial z}{\partial x} \right|_{x=b,y=c}, \quad \left. \frac{\partial z / \partial v}{dy / dv} \right|_{u=1,v=0} = \left. \frac{\partial z}{\partial y} \right|_{x=b,y=c}, \quad (2.1.17)$$

$$\left. \frac{\partial z / \partial u}{dx / du} \right|_{u=0,v=1} = \left. \frac{\partial z}{\partial x} \right|_{x=a,y=d}, \quad \left. \frac{\partial z / \partial v}{dy / dv} \right|_{u=0,v=1} = \left. \frac{\partial z}{\partial y} \right|_{x=a,y=d}, \quad (2.1.18)$$

$$\left. \frac{\partial z / \partial u}{dx / du} \right|_{u=1,v=1} = \left. \frac{\partial z}{\partial x} \right|_{x=b,y=d}, \quad \left. \frac{\partial z / \partial v}{dy / dv} \right|_{u=1,v=1} = \left. \frac{\partial z}{\partial y} \right|_{x=b,y=d}, \quad (2.1.19)$$

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v}}{\begin{pmatrix} dx & dy \\ du & dv \end{pmatrix}} \right|_{u=0, v=0} &= \left. \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} \right|_{x=a, y=c}, & \left. \frac{\frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v}}{\begin{pmatrix} dx & dy \\ du & dv \end{pmatrix}} \right|_{u=1, v=0} &= \left. \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} \right|_{x=b, y=c}, \\
 \left. \frac{\frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v}}{\begin{pmatrix} dx & dy \\ du & dv \end{pmatrix}} \right|_{u=0, v=1} &= \left. \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} \right|_{x=a, y=d}, & \left. \frac{\frac{\partial^2 z}{\partial u \partial v}}{\begin{pmatrix} dx & dy \\ du & dv \end{pmatrix}} \right|_{u=1, v=1} &= \left. \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} \right|_{x=b, y=d}.
 \end{aligned}
 \tag{2.1.20}$$

Все сказанное про управление процессом построения остается в силе и в этом случае. Такое управление производными в области интерполяции можно использовать для выполнения условий термодинамической согласованности УРС в этой области.

## 2.2 Алгоритм сшивания

Вернемся к нашей основной задаче – сшиванию поверхностей давления  $P(\rho, T)$  и энергии  $E(\rho, T)$ . На основе описанных выше теоретических и полуэмпирических моделей были получены две гладкие поверхности, разделенные между собой температурным промежутком  $\Delta T \sim 10$  эВ. Поверхности заданы таблицами размерности  $N_1 \times M$  в области низких температур ( $T < 1$  эВ) и  $N_2 \times M$  в области высоких температур ( $T > 10$  эВ).

Особенности поведения  $P(\rho, T)$  и  $E(\rho, T)$  накладывают на процесс сшивания некоторые ограничения. Во-первых, в сшиваемых поверхностях присутствуют особенности по плотности (фазовый переход 1-го рода в области нормальной плотности  $\rho_0 = 19.35$  г/см<sup>3</sup>), поэтому был выбран вариант сшивки так называемыми "лоскутами" (в некоторых источниках, например в [14], используется термин "порция"). Это означает, что для каждого шага по плотности от  $\rho_j$  до  $\rho_{j+1}$  выстраивается лоскут, сшивающий две поверхности между этими плотностями.

Во-вторых, функции  $P(\rho, T)$  и  $E(\rho, T)$  ведут себя, в основном, как показательные функции, а аргументы  $\rho$  и  $T$  изменяются в широких пределах  $\rho \in [10^{-4}, 10^4]$  г/см<sup>3</sup>,  $T \in [10^{-2}, 10^4]$  эВ, причем сетка в полученных на основе моделей вещества таблицах, как правило, логарифмически равномерна. Поэтому вместо поверхностей  $P(\rho, T)$  и  $E(\rho, T)$  будем сшивать поверхности  $\ln(P(\ln(\rho), \ln(T)))$  и  $\ln(E(\ln(\rho), \ln(T)))$ .

Проводить сшивку локальных УРС будем исходя из следующих положений:

1. УРС должен описывать экспериментальную ударную адиабату сплошного вольфрама;
2. Изохорическая теплоемкость должна быть положительной:

$$C_v = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_v > 0 \quad (V = 1/\rho - \text{удельный объем});$$

3. Полученные в результате полные давление  $P = P(\rho, T)$  и удельная внутренняя энергия  $E = E(\rho, T)$  должны быть термодинамически согласованными, т.е. удовлетворять соотношению:

$$\rho^2 \frac{\partial E}{\partial \rho} = P - T \frac{\partial P}{\partial T}. \quad (2.2.1)$$

Для оценки рассогласованности УРС обычно используют величину

$$\Delta = \frac{P - \tilde{P}}{P}, \quad (2.2.2)$$

где

$$\tilde{P} = \rho^2 \frac{\partial E}{\partial \rho} + T \frac{\partial P}{\partial T}, \quad (2.2.3)$$

а величины  $P$ ,  $\frac{\partial P}{\partial T}$  и  $\frac{\partial E}{\partial \rho}$  вычисляются по таблицам. Чем меньше значение  $\Delta$ , тем более согласованным считается полученное уравнение состояния;

4. По возможности надо удержать производные  $\left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_v$  и  $\left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_v$  близкими к монотонным в процессе сшивки;
5. Квадрат скорости звука неотрицателен:

$$C_s^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} \geq 0.$$

Важно отметить, что способ сшивки и выбранные для построения локальных УРС модели накладывают некоторые ограничения на поведение холодных кривых давления и удельной внутренней энергии в области высоких плотностей, т.к. небольшое изменение значения сшиваемой функции на границе области сшивания приводит к сильным изменениям производной интерполирующей функции по температуре и нарушению условий 2 и 4. Поэтому прежде чем проводить сшивку локальных УРС, необходимо проверить



холодные кривые давления и удельной внутренней энергии на предмет нарушения условий, предъявляемых к производным термодинамических функций по температуре и плотности, и, при необходимости, подкорректировать их. Холодные кривые, несомненно, должны быть термодинамически согласованы и удовлетворять условиям гладкого перехода к используемым табличным данным по локальным УРС, описывая нормальную плотность и коэффициент объемного сжатия

$$K = \rho \frac{\partial P}{\partial \rho} \quad (2.2.4)$$

при комнатной температуре.

Имея холодные кривые, удовлетворяющие сформулированным условиям, можно приступить к построению широкодиапазонного уравнения состояния вольфрама; для этого:

1. Склеиваем воедино УРС нижнего температурного диапазона, т.е. газовую часть, описанную в приближении Саха, и часть, соответствующую многофазной области и области твердого тела, описанную по модели QEOS;
2. Устанавливаем границы по температуре, от которых будет вестись сшивка;
3. Вычисляем для каждого интервала  $[\rho_j, \rho_{j+1}]$ ,  $j \in [1, M - 1]$  необходимые задающие параметры по формулам (2.1.13) – (2.1.20);
4. Проводим построение лоскутов Эрмита последовательно для всех интервалов по плотности.

После этого получаем искомое уравнение состояния, определенное на всем диапазоне  $\left\{ \rho \in [10^{-4}, 10^4] \text{ г/см}^3, T \in [10^{-2}, 10^4] \text{ эВ} \right\}$ .

На Рис. 2.2 – Рис. 2.7 представлены результаты применения вышеописанного алгоритма сшивания давления и энергии. Теперь можно перейти к заключительной части – исследованию полученного УРС.

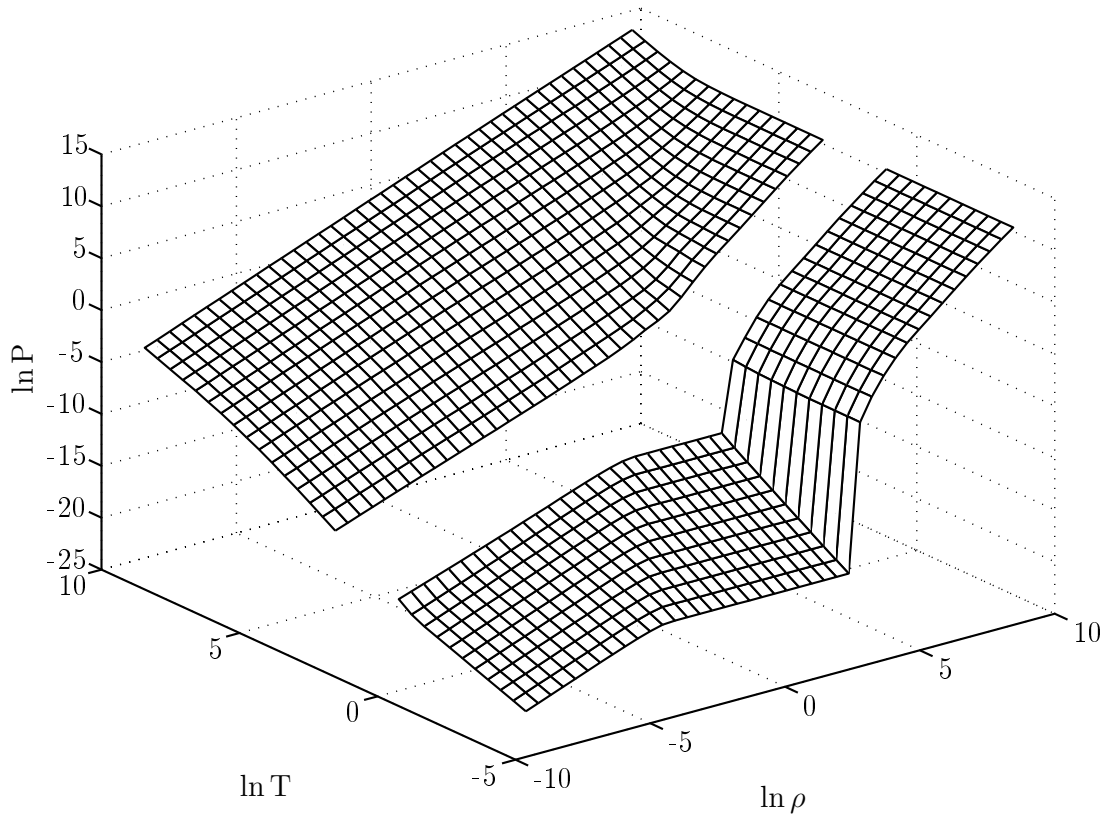


Рис. 2.2. Давление до сшивания

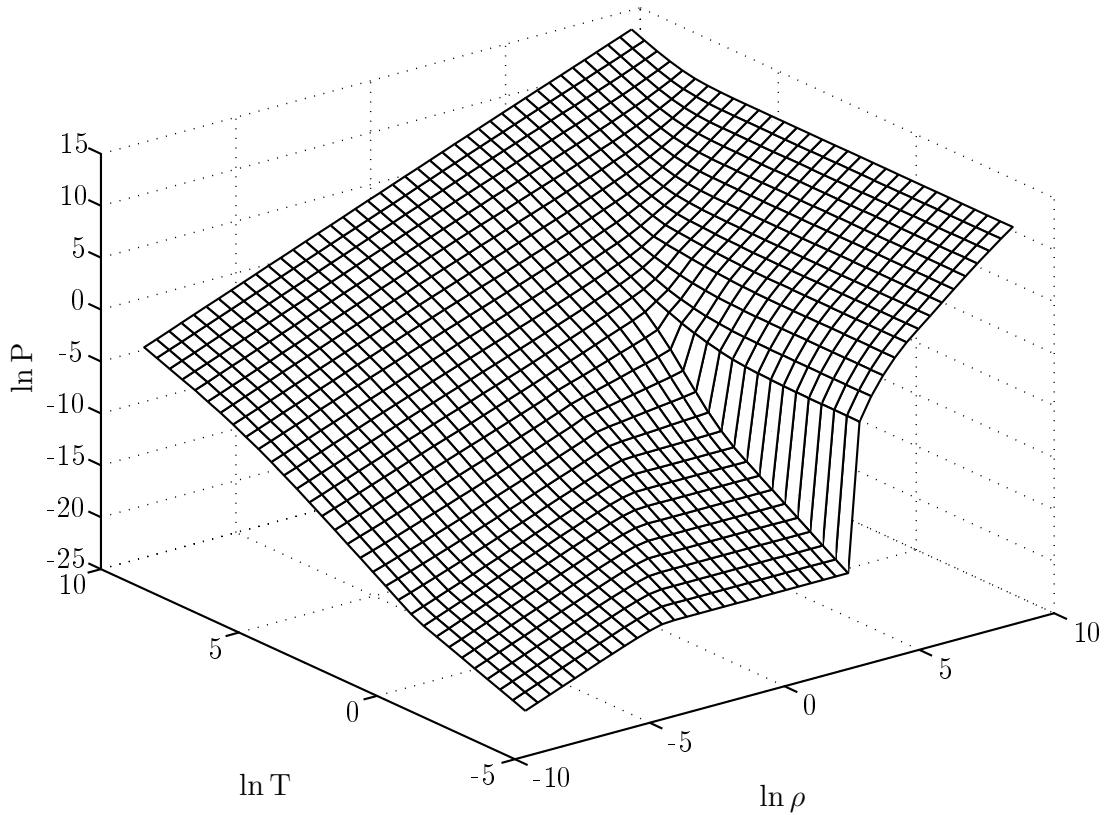


Рис. 2.3. Давление после сшивания

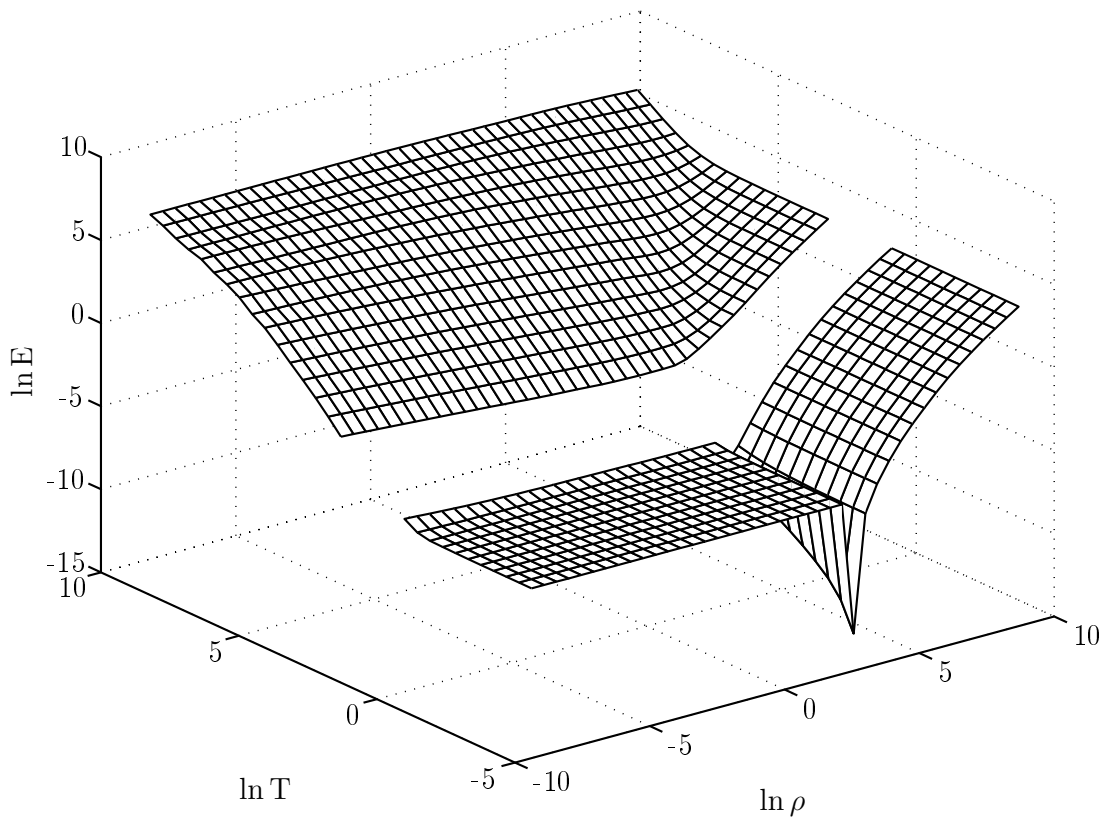


Рис. 2.4. Удельная внутренняя энергия до сшивания

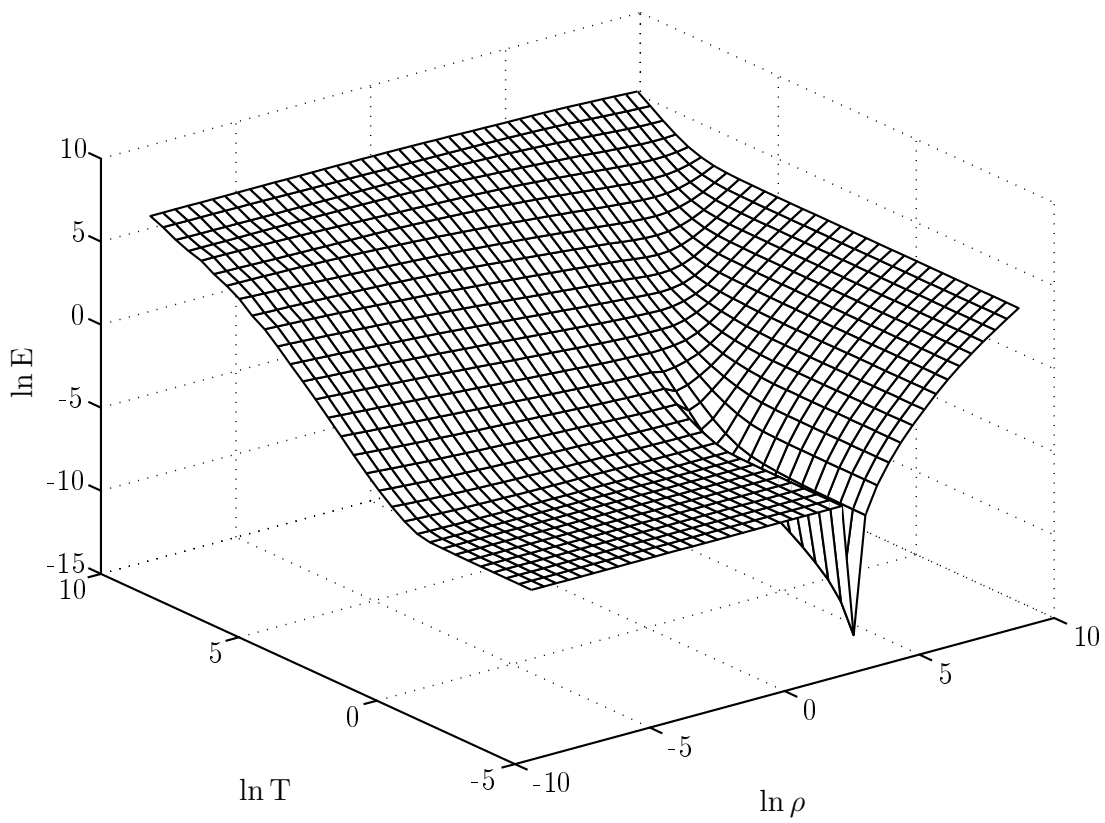


Рис. 2.5. Удельная внутренняя энергия после сшивания

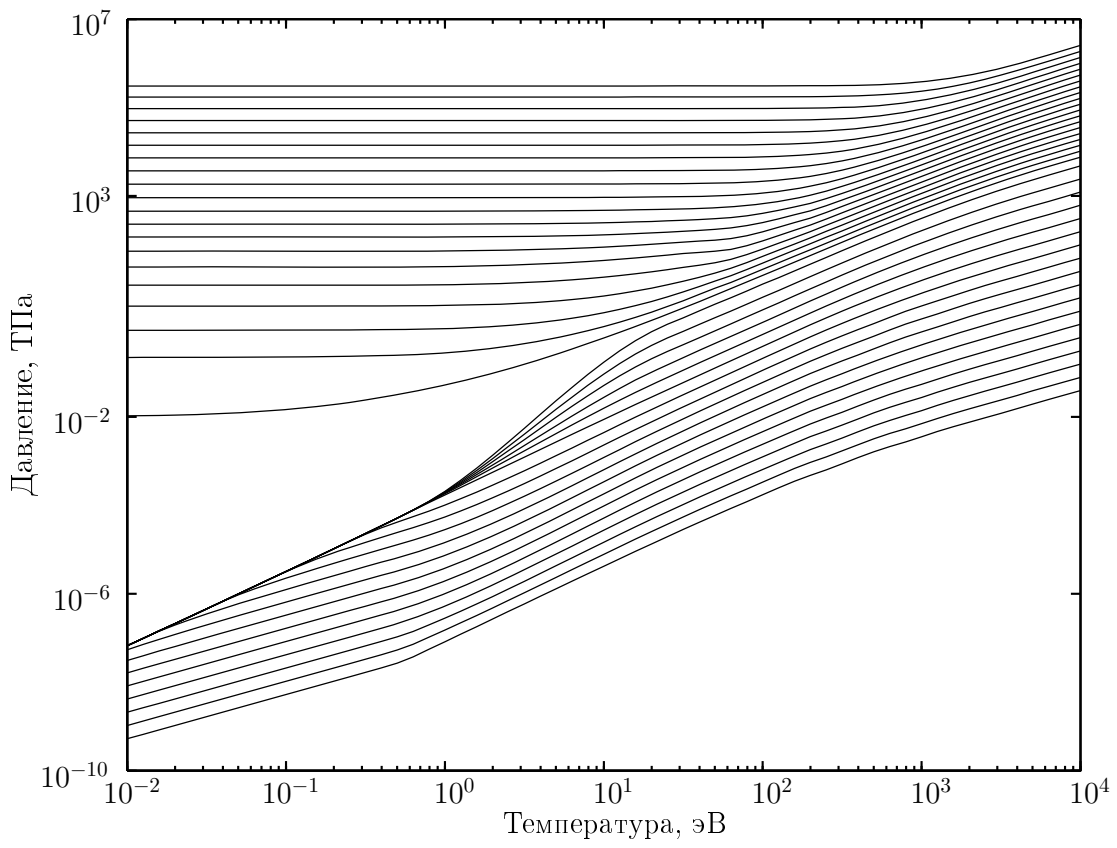


Рис. 2.6. Изохоры давления

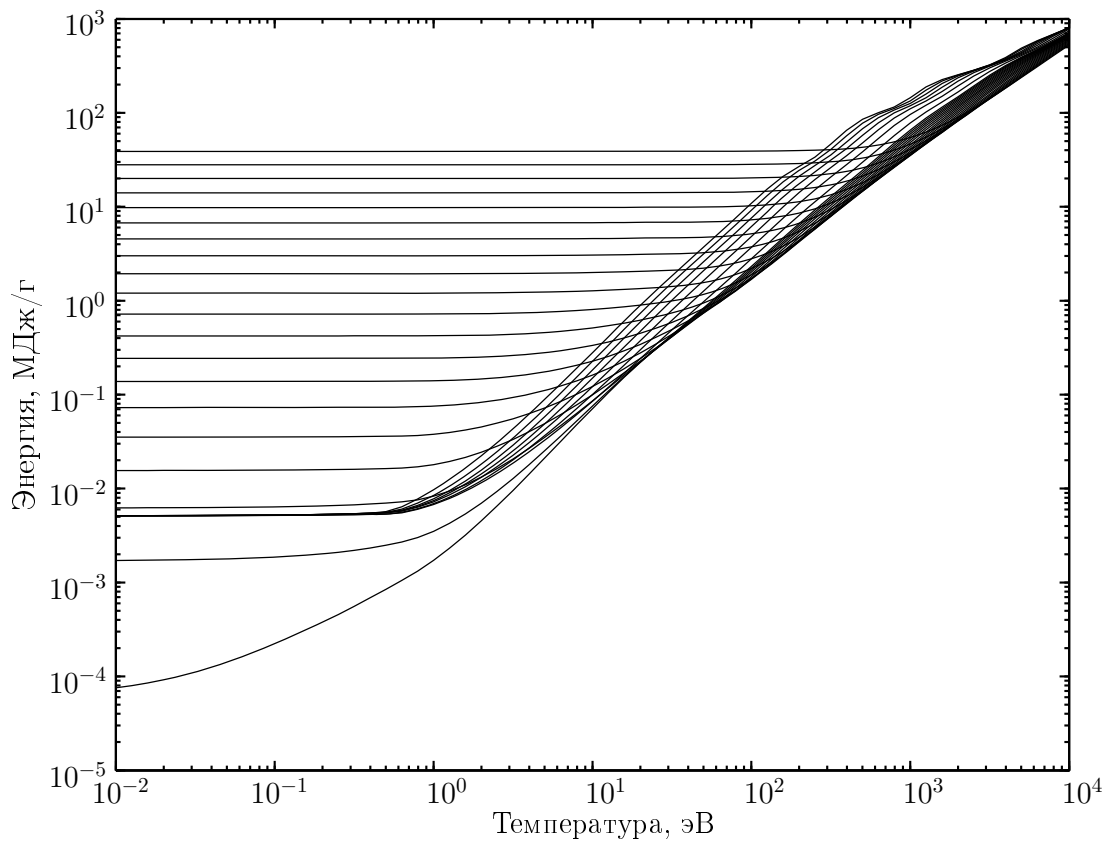


Рис. 2.7. Изохоры удельной внутренней энергии

### 3. Исследование широкодиапазонного УРС вольфрама

Прежде чем приступить к исследованию полученного широкодиапазонного УРС, отметим, что ключевым моментом в предложенном в данной работе методе является выбор моделей для построения локальных УРС. Поскольку на сам процесс сшивки накладываются минимальные условия, цель которых сохранить физическую адекватность конечного результата в области интерполяции, то вся ответственность за моделирование различных физических эффектов, передачу механических свойств и т.п., возлагается на используемые модели. То же самое надо сказать и про отрицательные свойства, например, про термодинамическую согласованность уравнения состояния. Так, если сшиваемые локальные УРС сильно рассогласованы, то трудно ожидать хорошей согласованности от широкодиапазонного УРС, построенного на их основе.

#### 3.1 Давление, энергия, теплоемкость и скорость звука. Коэффициент Грюнайзена

После сшивания поверхностей  $P(\rho, T)$  и  $E(\rho, T)$  получается широкодиапазонное уравнение состояния вольфрама в виде таблиц на логарифмически равномерных сетках по температуре и плотности. Основные условия, предъявленные к поведению термодинамических функций в пункте 2., выполнены, а именно:

1. Полученные поверхности  $P(\rho, T)$  и  $E(\rho, T)$  являются гладкими (непрерывны первые частные производные по обоим аргументам  $T$  и  $\rho$ ) на всем диапазоне изменения температуры и плотности (за исключением фазовых переходов). Отметим, что в большей части исследуемой области наблюдается гладкость первых частных производных термодинамических функций  $P(\rho, T)$  и  $E(\rho, T)$  по обоим аргументам;
2. Изохорическая теплоемкость положительна –  $C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_v > 0$ ;
3. Квадрат скорости звука неотрицателен –  $C_s^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} \geq 0$ .

Заметим, что в рассматриваемом УРС в многофазной области равновесие фаз не рассчитывалось, а полагалось  $P|_T = const$ , в соответствии с чем

перестраивалась удельная внутренняя энергия с помощью условия термодинамической согласованности. Так как на алгоритм сшивания никаких дополнительных условий для того, чтобы сохранить  $P|_T = const$  вплоть до выхода на критическую точку, не накладывалось, то в области сшивки изотермы давления в многофазной области получались с незначительным отличием от постоянных, что, конечно, повлияло на термодинамическую согласованность УРС в этой области. Однако есть основания полагать, что детальным описанием многофазной области (при этом, конечно, необходима фазовая кривая, построение которой можно провести по методу, описанному в [11]) и наложением дополнительных условий на алгоритм сшивки можно нивелировать этот недостаток.

Проведем сравнение полученного УРС с основными экспериментальными данными и теоретическими асимптотиками.

С хорошей степенью точности можно считать поведение вещества в области низких температур и малых плотностей близким к поведению идеального газа. Поэтому сравним полученные значения теплоемкости  $C_v = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_v$  в области низких температур и малых плотностей с теплоемкостью идеального газа

$$C_{v,id} = \left( \frac{dE_{id}}{dT} \right)_v = \frac{3}{2}R = 12.471 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К (теория),}$$

$$C_{v,calc} = 12.505 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К (расчет по построенному УРС).}$$

Таким же образом можно сравнить расчетную изобарическую теплоемкость  $C_p$  с экспериментальной [18] для нормальной плотности. Для большинства металлов в нормальных условиях  $C_p \approx C_v$ , поэтому для оценки можно взять  $C_v$ , вычисленное с помощью полученного УРС вблизи нормальной плотности при самой низкой температуре ( $10^{-2}$  эВ), и сравнить с табличным значением  $C_p$ :

$$C_{p,exp} = 24.35 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К (экспериментальные данные),}$$

$$C_{p,calc} \approx C_{v,calc} = 26.62 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К (расчет по построенному УРС).}$$

Сравним также экспериментальное значение модуля объемного сжатия  $K$  с расчетным (2.2.4) на основе построенного УРС:

$$K_{exp} = 300.0 \text{ ГПа (экспериментальные данные, при нормальных условиях);}$$

$$K_{calc} = 338.6 \text{ ГПа (расчет по УРС, } \rho = \rho_0 = 19.35 \text{ г/см}^3, T = 10^{-2} \text{ эВ).}$$

Обратимся далее к коэффициенту Грюнайзена

$$\gamma = \frac{vP_t}{E_t}.$$

Его непрерывность вне фазовых переходов и ограниченность служат положительной оценкой полученного УРС. Более того, в области твердой фазы при температуре близкой к нормальной, значения коэффициента Грюнайзена, вычисленные по модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными:

$$\begin{aligned} \gamma_{exp}(\rho_0) &= 1.55; & \gamma_{calc}(\rho_0) &= 1.42; \\ \gamma_{exp}\left(\frac{5}{3}\rho_0\right) &= 1.20; & \gamma_{calc}\left(\frac{5}{3}\rho_0\right) &= 1.27. \end{aligned}$$

Также можно оценить коэффициент Грюнайзена  $\gamma$  для малых плотностей и низких температур исходя из предположения, что вещество в этой области близко по поведению к идеальному газу:

$$\begin{aligned} \gamma_{id} &= \frac{vP_{id}}{E_{id}} = \frac{v\theta/v}{3\theta/2} = \frac{2}{3} \approx 0.6666, \\ \gamma_{calc} &= 0.6668. \end{aligned}$$

Сравним также величину удельной энергии сублимации  $E_s$ . Экспериментальную оценку величины удельной энергии сублимации можно получить, просуммировав удельную теплоту плавления и испарения с учетом затрат на нагрев вещества [18]:

$$E_{s,exp} = 5141 \text{ Дж/г.}$$

Оценку величины удельной энергии сублимации по построенному УРС можно получить исходя из асимптоты удельной внутренней энергии при нулевой температуре  $E_c(\rho)$  (холодная кривая удельной внутренней энергии) при плотности  $\rho \rightarrow 0$ , взяв значение  $E_c(\rho)$  при  $\rho = \rho_{\min} = 10^{-4} \text{ г/см}^3$ :

$$E_{s,calc} = 5137 \text{ Дж/г.}$$

Остановимся теперь на некоторых недостатках построенного УРС:

1. В области сшивки коэффициент Грюнайзена заметно осциллирует, что говорит о необходимости накладывать дополнительные условия на сшивку, чтобы устранить этот недостаток, или хотя бы снизить амплитуду колебаний и сделать коэффициент Грюнайзена более плавным;
2. Как уже отмечалось выше, для уточнения УРС в области фазовых переходов необходимо проводить детальное описание этой области с использованием фазовых кривых и расчетом фазового равновесия. Также желательно наличие параметров критической точки ( $T_{cr}$ ,  $P_{cr}$ ,  $E_{cr}$ ).

## 3.2 Термодинамическая согласованность полученного уравнения состояния

Средняя по всему диапазону изменения температуры и плотности рассогласованность полученного УРС составляет  $\sim 3.5\%$ . В однофазной области до фазового перехода максимальное значение рассогласованности построенного УРС  $\sim 50\%$ , в области высоких плотностей удалось снизить максимальное значение рассогласованности до  $\sim 30\%$ . Отмеченные в предыдущем подпункте недостатки сшивки в области фазовых переходов сказались на рассогласованности УРС, максимальное значение которой в этой области достигает  $\sim 200\%$ . Также необходимо отметить, что, как говорилось в начале данного пункта, на рассогласованность построенного широкодиапазонного УРС в области сшивки непосредственно влияют локальные УРС, поэтому качество (степень согласованности) сшиваемых локальных УРС (поверхностей  $P = P(T, \rho)$  и  $E = E(T, \rho)$ ) является одним из определяющих факторов хорошей термодинамической согласованности полученного на выходе результата. Отметим также, что сама по себе термодинамическая согласованность не является абсолютным показателем достоверности уравнения состояния, в частности, в ряде случаев рассогласованность УРС в некоторых областях по  $T$  и  $\rho$  может оказаться несущественной в практических приложениях.

Коснемся теперь вычислительной стороны определения термодинамической рассогласованности. В силу того, что построенный широкодиапазонный УРС представлен в виде таблиц  $\{P_{i,j}\}$  и  $\{E_{i,j}\}$ , заданных на сетке  $\{T_i, \rho_j\}$ , определение величины  $\Delta$  по формулам (2.2.2) – (2.2.3) связано со взятием разностных производных и последующей переинтерполяцией термодинамических функций. Поэтому вычисляемая степень термодинамической рассогласованности во многом зависит от способа численного дифференцирования и метода переинтерполяции. Это не относится к области сшивки, т.к. в ней термодинамические функции представлены в аналитическом виде (2.1.12) – (2.1.15), и их значения, равно как и значения их производных, можно вычислить по аналитическим же формулам в любой точке, принадлежащей области сшивки. Это наводит на мысль, что данный метод построения широкодиапазонных уравнений состояния хорошо бы дополнить методом переинтерполяции (или аналитической аппроксимации), позволяющим по имеющимся таблицам определять значения термодинамических функций и их производных в любой точке в диапазоне изменения плотности и температуры. При этом метод переинтерполяции (аппроксимации) должен, как минимум, удовлетворять требованиям, предъявленным к предложенному алгоритму сшивки и сформулированным в пункте 2. Представляется перспективным использование принципов аппроксимации, предложенной в [19].



### 3.3 Ударные адиабаты и их сравнение с экспериментом

Ударная адиабата сжатия, или адиабата Гюгонио, определяется множеством точек  $\{P, \rho\}$ , для которых выполняется соотношение [10]:

$$2(E - E_0) = (P + P_0) \left( \frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \quad (3.3.1)$$

где  $E_0, P_0, \rho_0$  – внутренняя энергия, давление и плотность невозмущенного вещества;  $E, P, \rho$  – соответствующие величины за фронтом ударной волны для сжатого вещества. Это соотношение является следствием законов сохранения и обычно служит для построения ударных адиабат при известном уравнении состояния исследуемого вещества. В эксперименте по ударному сжатию, как правило, измеряется скорость ударной волны  $D$ , а также массовая скорость  $U$ . Величины  $D$  и  $U$  связаны с  $E_0, P_0, \rho_0, E, P, \rho$  следующим образом:

$$U = \sqrt{\frac{2(E - E_0)(P - P_0)}{P + P_0}}, \quad (3.3.2)$$

$$D = \frac{P - P_0}{\rho_0 U}.$$

На основе эксперимента обычно строят зависимость  $D = D(U)$  в некотором диапазоне скоростей  $U$  [20], [22].

На Рис. 3.1 приведена ударная адиабата сжатия сплошного вольфрама с начальной плотностью  $\rho_0 = 19.17$  г/см<sup>3</sup>, построенная на основе полученного УРС (сплошная кривая). Видно, как она вливается в экспериментальную адиабату (кружки) [20] при плотностях, близких к нормальной. Некоторое отличие расчетной адиабаты от экспериментальных данных при высоких плотностях может быть обусловлено погрешностью последних при высоких плотностях, хотя расчетная адиабата находится в пределах погрешности эксперимента.

Отметим также хорошее согласие с экспериментом расчетных ударных адиабат пористого вольфрама различной степени пористости, хотя при построении широкодиапазонного УРС вольфрама данные о пористых адиабатах не использовались (см. Рис. 3.2 – Рис. 3.4, где изображены начальные участки расчетных ударных адиабат пористого вольфрама и экспериментальные данные [21–22]).

Таким образом, предложенная методика позволяет единым образом строить широкодиапазонные уравнения состояния на основе хорошо зарекомендовавших себя моделей вещества. Вместе с тем требуется провести уточнение описания зонной структуры энергетического спектра электронов и более детально рассчитывать равновесное состояние в области фазовых переходов.

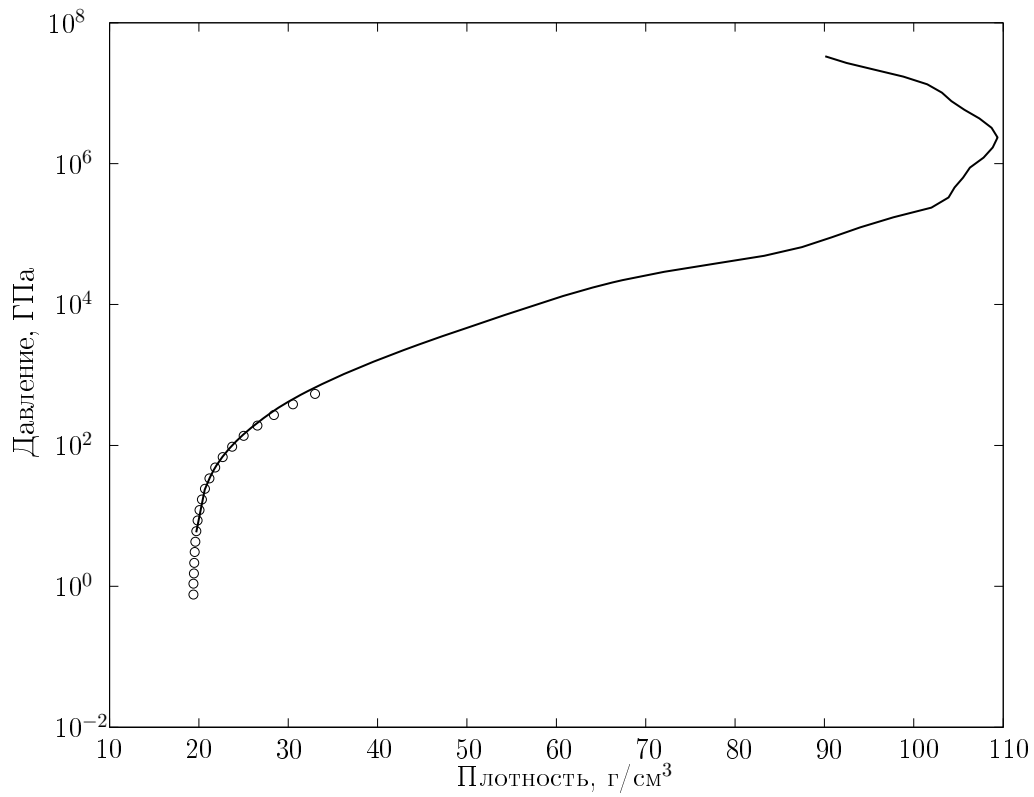


Рис. 3.1. Ударная адиабата сжатия сплошного вольфрама,  $\rho_0 = 19.17 \text{ г}/\text{см}^3$

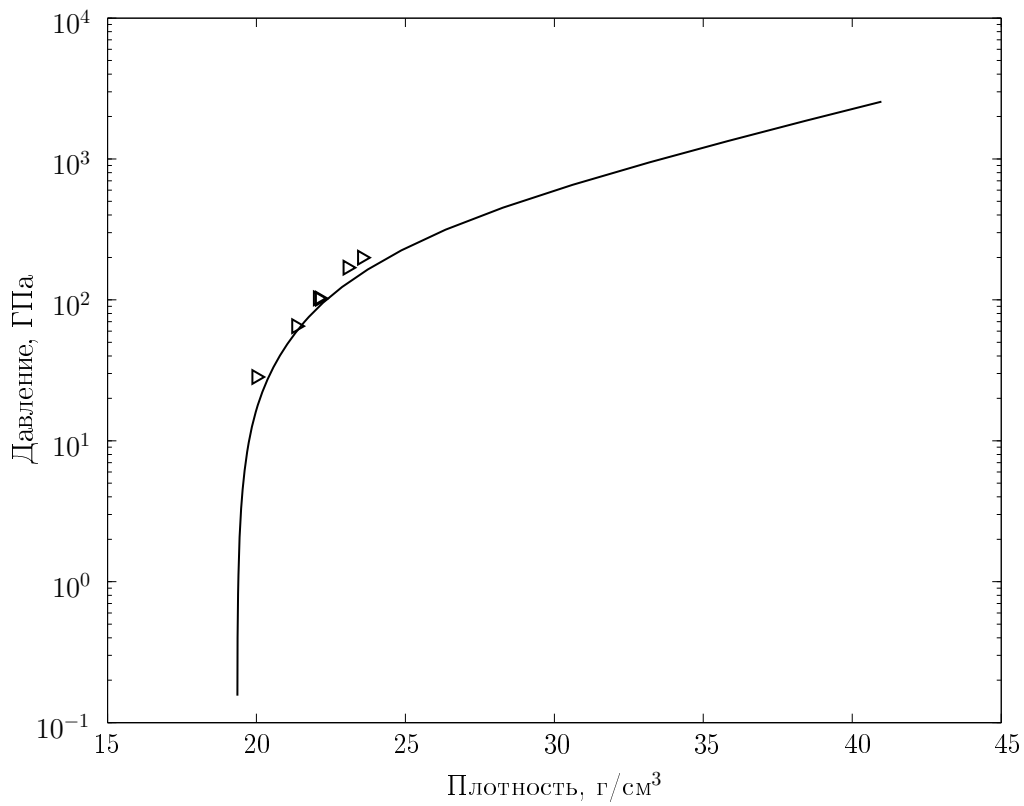


Рис. 3.2. Начальный участок ударной адиабаты пористого вольфрама, пористость  $m = 1.44$  ( $\rho_0 = 13.3358 \text{ г}/\text{см}^3$ )

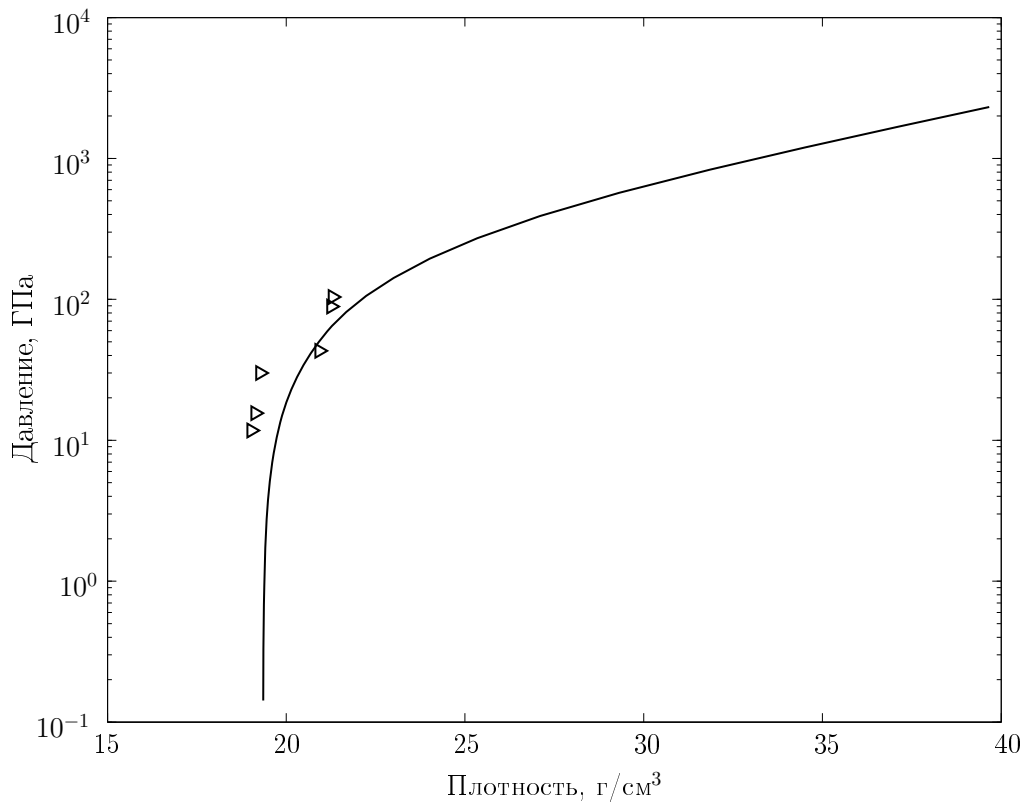


Рис. 3.3. Начальный участок ударной адиабаты пористого вольфрама, пористость  $m = 1.53$  ( $\rho_0 = 12.572 \text{ г/см}^3$ )

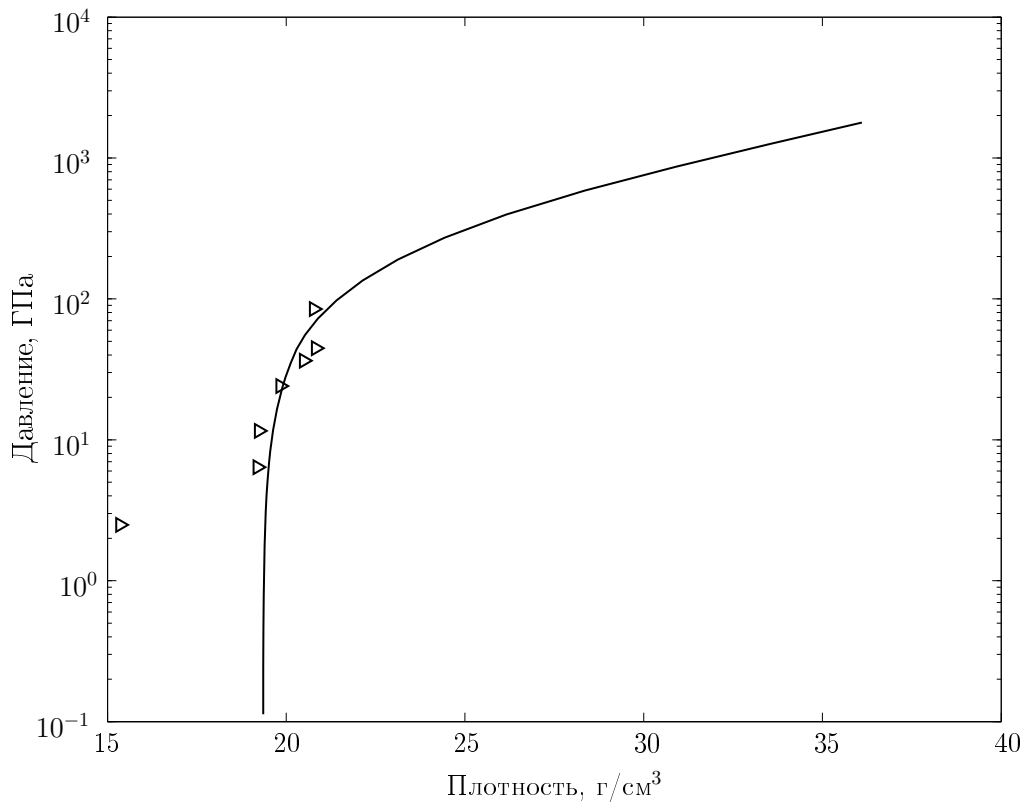


Рис. 3.4. Начальный участок ударной адиабаты пористого вольфрама, пористость  $m = 1.816$  ( $\rho_0 = 10.592 \text{ г/см}^3$ )

## Список литературы

- [1] *Deeney C., Nash T.J., Spielman R.B., et al.* Power enhancements by increasing the initial array radius and wire number of Z-pinchs. — *Phys Rev E* 1997;56:5445–58.
- [2] *Елисеев Г.М., Клинишов Г.Е.* Уравнение состояния твердых веществ и его сплайнаппроксимация. — Препринт N 173. — М.: ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1982. — С. 21.
- [3] *Альтшулер Л.В., Кормер С.Б., Баканова А.А. и др.* Уравнение состояния алюминия, меди и свинца для области высоких давлений // *ЖЭТФ*. — 1960. — Т. 38, Вып. 3. — С. 790–798.
- [4] *Альтшулер Л.В., Крупников К.К., Леденев В.Н. и др.* Динамическая сжимаемость и уравнения состояния железа при высоких давлениях // *ЖЭТФ*. — 1958. — Т. 34. — С. 874–885.
- [5] *Бушман А.В., Фортов В.Е.* Модели уравнения состояния вещества // *УФН (Успехи Физических Наук)* — 1983. — Т. 140. — С. 177–232.
- [6] *Гударенко Л.Ф., Куделькин В.Г.* Построение широкодиапазонных уравнений состояния путем 'сшивки' локальных уравнений с использованием модели смеси. — *Химическая физика*, 2002, Т. 21, N 10, С. 11–18.
- [7] *Калиткин Н.Н.* Квазизонное уравнение состояния. — *Математическое моделирование*. 1989. — Т. 1, вып. 2. — С. 64–108.
- [8] *Trainor K.S.* Construction of a wide-range tabular equation of state for copper — *J. Appl. Phys.*, 1983 V. 54, N 5. — P. 2372.
- [9] *Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортов В.Е.* Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. — Черногловка: ИХЧФ РАН, 1992.
- [10] *Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегаов и уравнений состояния. — *ФИЗМАТЛИТ*, 2000.
- [11] *More R.M., Warren K.H., Young D.A., Zimmerman G.B.* A new Quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter. — *Physics of fluids* 31 (10), October 1988.

- [12] *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных явлений. — Наука, 1966.
- [13] *Загонов В.П., Новиков В.Г.* Локальная аппроксимация двумерных таблиц на неравномерных сетках. — ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — Препринт N 58. — М., 1997. — С. 21.
- [14] *Фокс А.Д., Пратт М.Дж.* Вычислительная геометрия. Применение в проектировании и на производстве. — Мир, 1982.
- [15] *Шенен П., Консар М., Гардан И., Робер Ф., Робер И.* Математика и САПР. Книга 1 — Мир, 1988.
- [16] *Жермен-Лакур П., Жорж П.Л., Пистр Ф., Безье П.* Математика и САПР. Книга 2 — Мир, 1989.
- [17] *Завьялов Ю.С., Леус В.А.* Сплаины в инженерной геометрии. — Машиностроение, 1985.
- [18] *Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М., и др.* Физические величины. Справочник — Энергоатомиздат, 1991.
- [19] *Прокопов Г.П.* Аппроксимация табличных уравнений состояния для расчета газодинамических задач — ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — Препринт N 80. — М., 2004.
- [20] *Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Трунин Р.Ф., Фортов В.Е.* Экспериментальные данные по ударной сжимаемости и адиабатическому расширению конденсированных веществ при высоких плотностях энергии. — РФЯЦ ВНИИЭФ, 1996.
- [21] *Бушман А.В., Ломоносов И.В., Хищенко К.В., Копышев В.П., Кузьменков Е.А., Коган В.Е., Левашов П.Р., Ломов И.Н.* <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/> — База данных по ударному сжатию материалов и веществ.
- [22] *Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В.* Экспериментальные данные по ударноволновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. — РФЯЦ ВНИИЭФ, 2001.