

те вычислений параметров
и при расчете из первых
ся со всеми имеющимися
оптически сжатых водорода

PRESSURE RANGE

ogolovka, Russia
msk, Russia
scow, Russia
ty), Dolgoprudnyi, Russia

e gases at high pressures and
ature and are used in various
ions of processes inside the
f state of hydrogen and noble
experimentally studied with
ases in the megabar pressure
strong Coulomb interaction
th within the quasichemical
involving the direct numerical
experimental and theoretical
amicably compressed gases is
a phase transitions at high
data on caloric and thermal
ompression from kilobars to
m density. Last several years
io methods in a wide range of

Hugoniots for different initial
i for isentropic one. These
oved SAHA-family models.
nd noble gases, the same for
f thermodynamic parameters
shown that in the considered
ongly coupled, degenerated
d parameters of plasma are
al quantum methods. Results
data on shock and quasi-

**УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПЛОТНЫХ ГАЗОВ
С УЧЕТОМ ХИМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ**

Э.Р. Прууэл, Л.А. Мерзиевский, К.А. Тен

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Приводится описание модели, разработанного алгоритма и программного комплекса позволяющего автоматически вычислять равновесные термодинамические параметры как разреженных, так и плотных смесей химически реагирующих газов с плотностями до 3 г/см^3 и температурами от 200 до 5000 К.

Для учета межмолекулярного взаимодействия использовались парные межмолекулярные потенциалы (exp-6 и Леннарда-Джонса). Для учета сложной зависимости теплоемкости от температуры использовались статистические суммы внутренних степеней свободы молекул, зависимости которых от температуры определены для разреженных газов и затабулированные для широкого круга веществ. Для вычисления равновесного химического состава, давления и внутренней энергии применялись статистические методы Монте-Карло.

Используя NVT ансамбль, в однообразном подходе определялись параметры газовой смеси. В основном рассматривались относительно несложные соединения определяющие энергетику детонации конденсированных взрывчатых веществ: N_2 , N, O, O_2 , H_2 , H, H_2O , OH, CO_2 , CO, NO, CH_4 , NH_3 и конденсированные компоненты углерода, оксида алюминия и оксида кремния. При учете конденсированных фаз использовалось приближенное уравнение состояния – постоянная плотность.

Калибровка уравнений состояния проводилась как по ударно-волновым и детонационным данным опубликованным в литературе, так и по данным скоростной рентгеновской томографии плотности расширяющихся продуктов детонации цилиндрических зарядов.

Программный комплекс (<http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/>) позволяет определять равновесный химический состав, термодинамические характеристики смеси и параметры некоторых газодинамических течений: ударные и детонационные волны, волны разрежения.

**РАСЩЕПЛЕНИЕ УДАРНОГО ФРОНТА И ДВУВОЛНОВАЯ
КОНФИГУРАЦИЯ В РАСПЛАВЕ НИТРАТА АММОНИЯ**

С.А. Колдунов, А.Э. Чухарев

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия

При исследовании ударной сжимаемости расплава нитрата аммония с применением электромагнитного метода записи профиля массовой скорости обнаружено, что в расплавленном состоянии в этом веществе существуют условия для развития структурной неустойчивости ударного фронта и образования двуволновой конфигурации. Подобное явление непосредственно наблюдалось ранее в твердых средах и связывалось с протеканием фазовых превращений (физико-химических процессов) в пределах фронта ударного сжатия [1]. В этой связи изломы и разрывы, наблюдаемые на соответствующих экспериментальных зависимостях при