

理想线弹性体的等温物态方程

温 原

浙江瑞堂塑料科技有限公司, 浙江 宁波

收稿日期: 2024年3月26日; 录用日期: 2024年5月17日; 发布日期: 2024年5月29日

摘 要

固体的物态方程多为经验公式, 少量为基于微观力学的扩展, 方程复杂且有效性低, 建立有效的理论性的物态方程, 一直是业内的梦想。本研究从材料力学角度出发, 建立了一种理想线弹性体的2参数等温物态方程, 该方程具有Bridgman方程的形式, 方程参数仅为弹性模量和泊松比; 对75中物质的弹性段数据进行了验证, 发现新方程的符合性良好, 可靠性佳, 拟合精度可控制在3.72%以内。同时得出体积模量的一阶导数是泊松比的单一函数, 揭示了这两个参数之间的深刻联系。

关键词

等温物态方程, 材料力学, 泊松比, 体积模量, 弹性模量

The Isothermal Equation of State for Ideal Linear Elastomers

Yuan Wen

Zhejiang Rotoun Plastic Technology Co., Ltd., Ningbo Zhejiang

Received: Mar. 26th, 2024; accepted: May 17th, 2024; published: May 29th, 2024

Abstract

The equations of state for solids are mostly empirical formulas, with a small number being extensions based on micromechanics. The equations are complex and have low effectiveness. Establishing effective theoretical equations of state has always been a dream in the industry. This study establishes a 2-parameter isothermal equation of state for an ideal linear elastic body from the perspective of material mechanics. The equation takes the form of the Bridgman equation, with only elastic modulus and Poisson's ratio as its parameters; The elastic segment data of 75 substances were validated, and it was found that the new equation has good consistency, reliability,

and fitting accuracy can be controlled within 3.72%. At the same time, the first-order derivative of the bulk modulus is a single function of Poisson's ratio, revealing the profound connection between these two parameters.

Keywords

Isothermal Equation of State, Materials Mechanics, Poisson's Ratio, Bulk Modulus, Elastic Modulus

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

固体物质的等温物态方程形式各异, 复杂程度不一, 在目前研究的等温物态方程中, 影响的参数主要是等温零压体积模量 B_0 及其各阶导数 $B^{(n)}$, 少部分方程也引入了爱格系数等其他参数[1]。

材料力学是研究物质宏观受力状态下变形规律的学科, 主要影响因素为应力方式, 泊松比, 弹性模量等。材料的单轴拉伸试验和静水压试验是其基础研究方式。从应力应变规律上, 将物质归结为弹性体、塑性体和粘性体及其混合体, 其中, 线弹性体是材料力学研究的基础模型[2]。

等温物态方程和材料力学, 都是研究在受到外力下物质几何形态的变化规律, 理论上应有相通之处, 但目前较少有研究者将这两个学科联系起来考虑。本工作从理想线弹性体的弹簧模型出发, 建立了新的等温物态方程, 并研究了其特性。

2. 模型的建立

材料力学中基于胡克定律建立的应力应变规律, 均是在体积不变的假设下进行的。已有研究指出, 在理想线弹性体的单轴拉伸试验中, 体积不变的假设是不适合的, 并引出体积应变满足式(1)的规律[3]:

$$\varepsilon_v = \lambda_x \left[1 + \nu_0 (1 - \lambda_x^2) \right] \quad (1)$$

式中, $\varepsilon_v = V/V_0$, 为体积应变, λ_x 为拉伸比, ν_0 为初始泊松比。

由于拉伸比 λ_x 为试验参数, 随试验过程变化, 可视为自变量, 因此式(1)说明, 理想线弹性体在受到外力作用下体积应变 ε_v 的变化规律仅和初始泊松比 ν_0 有关, 这为物质建立统一的物态方程建立了基础。

基于以下假设:

- 1) 物质在外力作用下产生形变, 其规律和外力的方向无关;
- 2) 物质在外力作用下不发生相变;
- 3) 物质在外力作用下, 由弹性体向塑性体转变, 其转变点由弹性极限决定。

线应变 $\varepsilon_x = \lambda_x - 1$, 静水压力 $P = -\frac{1}{3}\sigma_x$, 对于理想线弹性体有应力 $\sigma_x = E\varepsilon_x$ (E 为弹性模量), 将上三式代入式(1), 有:

$$1 - \varepsilon_v = \frac{3(1 - 2\nu_0)}{E} P + \frac{27\nu_0}{E^2} P^2 - \frac{27\nu_0}{E^3} P^3 \quad (2)$$

理想线弹性体等温物态方程的这一形式和 Bridgman [4]经验方程一致, 并将其影响因素缩减为弹性模

量和泊松比两个参数。式(2)的另外一个意义是对 Bridgman 方程进行了理论解释。

对式(2)求解等温体积模量及其一阶导数： $B = -V(\partial P/\partial V)_T$ ， $B' = (\partial B/\partial P)_T$ 得到当压力 $P = 0$ 时的参数：

$$B_0 = \frac{E}{3(1-2\nu_0)} \quad (3)$$

$$B'_0 = -1 + \frac{3}{(1-2\nu_0)} - \frac{3}{(1-2\nu_0)^2} \quad (4)$$

式(3)和经典理论一致。式(4)显示，对理想线弹性体，体积模量的一阶导数是泊松比的单一函数，这深刻揭示了泊松比和体积模量一阶导数的关系是一体两面的。

由于理想线弹性体的初始泊松比范围为 $\nu_0 \in (0, \infty)$ [3]，因此有 $B_0 \in (-\infty, 0) \cup (1, +\infty)$ 和 $B'_0 \in (-\infty, -1)$ 。

进而，对式(2)连续求导，可知体积模量的 n 阶导数的零点值均为弹性模量 E 和初始泊松比 ν_0 的关系式： $B_0^{(n)} = f(E, \nu_0)$ 。由于固体物质在小变形下均可看做理想弹性体，因此我们可以通过单轴拉伸试验的 E 及 ν_0 数据测算物态方程的各参数，也可以通过测量物态方程的参数来预测物质的初始弹性模量和初始泊松比，这在一些极端条件下的某些测量提供了替代的方法。

3. 数据验证

3.1. 拟合最大误差

固体物质体积模量、弹性模量和泊松比的准确测量均较为困难，不同实验室得出的结果往往差异较大，为了提高验证的有效性，本工作选取的某一物质的数据尽量为同一文献提供，仅有部分数据出自不同文献(如硼、铍、铈、铟等)，同时，选取了具有物态方程的拟合数据的文献，并通过拟合的物态方程先求出物质的 B_0 数值，再结合泊松比按式(3)求出弹性模量 E ，进而拟合出式(2)。

式(2)仅适用于线弹性体，由于大部分物质的弹性段很小，弹性极限一般不大于 0.2% [5]，因此本工作将大部分材料的最大压力 P_{\max} 控制在 $0.002E/3$ 以内，其中铍(4 Be)为脆性固体，单轴拉伸试验的延伸率常为零，但在压缩状态时为易塑性材料，这说明金属铍的弹性极限非常小，文献[6]指出，常规的铍材，其弹性极限下的拉伸应力仅为 60 MPa 左右，对应的最大静水压力为 20 MPa，弹性极限约为 0.02%。金刚石(6C, d)的弹性极限约为 0.05% [7]。

在对比数据段，式(2)为单调递增函数，因此使用压力为 P_{\max} 时的对比数据作为最大误差 δ_{\max} 进行拟合评价。结果见表 1。

Table 1. Comparison of errors in the equation of state for 75 substances

表 1. 75 种物质的物态方程误差比较

物质	类别	文献值				计算值				
		ν_0	B_0/GPa	$B'_0(W)$	来源	$B'_0(J)$	E/GPa	P_{\max}/MPa	δ_{\max}	ϕ
3 Li	金属	0.362	12.08	-45.3	文献[8]	-29.5	10	6.67	-0.43%	53.59%
4 Be	金属	0.039	104.35	-83.1	文献[8]	-1.3	288.63	19.24	-0.75%	6418.01%
5 B	非金属单质	0.089	396.5	4.2	文献[8][9]	-1.8	977.77	651.85	0.49%	-331.96%
6 C g 石墨烯	非金属单质	0.27	566.51	-1.0	文献[8]	-8.7	781.78	521.19	0.35%	-88.45%
d 金刚石	非金属单质	0.18	35.15	-73.5	文献[8]	-3.6	67.49	11.25	-1.10%	1920.58%
11 Na	金属	0.315	7.19	-38.1	文献[8]	-14.8	7.98	5.32	-0.85%	157.26%
12 Mg	金属	0.28	35.22	-37.7	文献[10]	-9.7	46.49	30.99	-1.21%	289.17%

续表

13 Al	金属	0.34	75.03	-53.7	文献[8]	-20.9	72.03	48.02	-1.03%	156.54%
14 Si	非金属单质	0.34	97.93	-57.8	文献[10]	-20.9	94.02	62.68	-1.16%	176.29%
15 P 白磷	非金属单质	0.335	4.88	-1.0	文献[8]	-19.5	4.83	3.22	0.61%	-94.86%
16 S (r)	非金属单质	0.343	10.12	-41.3	文献[8]	-21.9	9.53	6.35	-0.60%	88.96%
19 K	金属	0.35	3.3	-40.2	文献[8]	-24.3	2.97	1.98	-0.47%	65.40%
20 Ca	金属	0.31	15.81	-36.7	文献[8]	-13.9	18.02	12.01	-0.86%	164.66%
22 Ti	金属	0.345	109.17	-42.6	文献[10]	-22.5	101.53	67.69	-0.61%	88.95%
23 V	金属	0.36	142.63	-133.0	文献[10]	-28.6	119.81	79.87	-2.82%	365.95%
24 Cr	金属	0.209	197.85	-48.4	文献[8]	-4.7	345.45	230.3	-2.48%	930.03%
25 Mn	金属	0.24	62.03	-61.1	文献[8]	-6.3	96.76	64.51	-2.76%	866.32%
26 Fe	金属	0.279	175.03	-48.0	文献[8]	-9.6	232.09	154.73	-1.67%	401.86%
27 Co	金属	0.334	196	3.3	文献[10][11]	-19.2	195.22	130.15	0.75%	-117.27%
28 Ni	金属	0.3	193.86	-40.0	文献[8]	-12.3	232.63	155.09	-1.09%	226.81%
29 Cu	金属	0.345	136.14	-72.9	文献[8]	-22.5	126.61	84.41	-1.53%	223.61%
30 Zn	金属	0.29	62.22	-57.4	文献[8]	-10.9	78.39	52.26	-1.91%	428.32%
31 Ga	金属	0.235	59.29	-1.0	文献[8]	-6.0	94.26	62.84	0.27%	-83.39%
32 Ge	金属	0.27	80.29	-45.5	文献[8]	-8.7	110.8	73.87	-1.66%	425.55%
33 As	非金属单质	0.335	40.97	-91.7	文献[8]	-19.5	40.56	27.04	-2.32%	371.54%
34 Se	非金属单质	0.338	8.18	-53.8	文献[10]	-20.3	7.95	5.3	-1.07%	164.68%
37 Rb	金属	0.356	3.27	-32.3	文献[8]	-26.8	2.82	1.88	-0.16%	20.86%
38 Sr	金属	0.304	11.8	-39.4	文献[10]	-12.9	13.88	9.25	-1.03%	206.26%
39 Y	金属	0.258	44.94	-29.7	文献[10]	-7.6	65.26	43.5	-1.06%	290.54%
40 Zr	金属	0.34	103.35	-38.8	文献[10]	-20.9	99.21	66.14	-0.57%	85.62%
41 Nb	金属	0.35	147.54	-112.0	文献[10]	-24.3	132.78	88.52	-2.54%	360.14%
42 Mo	金属	0.3	283.41	-25.4	文献[8]	-12.3	340.09	226.73	-0.52%	107.43%
44 Ru	金属	0.29	333.57	2.6	文献[8][12]	-10.4	420.1	280.06	0.56%	-125.54%
45 Rh	金属	0.27	281.22	-28.4	文献[8]	-8.7	388.09	258.73	-0.90%	227.88%
46 Pd	金属	0.375	188.04	-161.4	文献[8]	-37.0	141.03	94.02	-2.99%	336.11%
47 Ag	金属	0.37	104.69	-8.0	文献[8]	-33.8	81.66	54.44	0.67%	-76.49%
48 Cd	金属	0.3	48.6	-56.4	文献[8]	-12.3	58.33	38.88	-1.73%	360.69%
49 In	金属	0.45	42.72	-46.3	文献[8][13]	-271.0	10.25	6.84	2.24%	-82.92%
50 Sn (w)	金属	0.33	56.34	-51.4	文献[8]	-18.1	57.46	38.31	-1.11%	183.65%
51 Sb	金属	0.31	42.49	-36.6	文献[10]	-13.9	48.44	32.29	-0.85%	163.97%
52 Te	非金属单质	0.33	20.96	-66.6	文献[10]	-18.1	21.38	14.25	-1.62%	267.66%
55 Cs	金属	0.356	2.11	-37.2	文献[10]	-26.8	1.82	1.22	-0.30%	39.00%
56 Ba	金属	0.28	10.71	-21.4	文献[8]	-9.7	14.14	9.43	-0.51%	121.03%

续表

57 La	金属	0.288	25.26	-43.8	文献[8]	-10.6	32.13	21.42	-1.38%	312.78%
58 a-Ce	金属	0.295	26.2	3.1	文献[8] [14]	-11.5	32.21	21.47	0.60%	-126.78%
59 Pr	金属	0.305	29.56	-34.7	文献[10]	-13.0	34.59	23.06	-0.84%	166.28%
60 Nd	金属	0.306	33.31	-35.6	文献[8]	-13.2	38.77	25.85	-0.86%	169.94%
62 Sm	金属	0.352	30.57	-34.4	文献[8]	-25.1	27.14	18.1	-0.27%	36.91%
63 Eu	金属	0.286	15.3	-21.6	文献[8]	-10.4	19.65	13.1	-0.48%	108.48%
64 Gd	金属	0.259	36.67	-38.7	文献[10]	-7.7	53.02	35.35	-1.47%	403.67%
65 Tb	金属	0.261	41.45	-1.0	文献[8]	-7.9	59.44	39.63	0.33%	-87.27%
66 Dy	金属	0.243	42.11	-40.9	文献[10]	-6.5	64.93	43.29	-1.73%	527.81%
67 Ho	金属	0.255	41.25	-41.4	文献[8]	-7.4	60.64	40.43	-1.64%	461.83%
68 Er	金属	0.238	45.44	-35.3	文献[10]	-6.2	71.43	47.62	-1.50%	469.09%
69 Tm	金属	0.235	41.27	-43.7	文献[8]	-6.0	65.62	43.74	-1.95%	625.64%
70 Yb	金属	0.284	13.79	-23.2	文献[8]	-10.1	17.88	11.92	-0.56%	128.98%
71 Lu	金属	0.233	42.76	-43.3	文献[8]	-5.9	68.49	45.66	-1.95%	633.54%
72 Hf	金属	0.3	114.9	-1.0	文献[8]	-12.3	137.88	91.92	0.45%	-91.84%
73 Ta	金属	0.35	208.53	-20.7	文献[8]	-24.3	187.68	125.12	0.11%	-15.12%
74 W	金属	0.284	336.1	18.5	文献[10]	-10.1	435.58	290.39	1.25%	-282.51%
75 Re	金属	0.293	386.26	-1.0	文献[8]	-11.3	479.73	319.82	0.42%	-91.12%
77 Ir	金属	0.26	369.46	9.3	文献[8] [15]	-7.8	532.03	354.68	0.82%	-219.91%
78 Pt	金属	0.38	289.45	-15.4	文献[8]	-40.6	208.4	138.93	0.60%	-62.08%
79 Au	金属	0.425	180.03	-51.2	文献[8]	-114.3	81.02	54.01	0.94%	-55.23%
81 Tl	金属	0.444	37.35	2.6	文献[8] [16]	-213.4	8.96	5.98	2.44%	-101.21%
82 Pb	金属	0.44	44.69	-36.8	文献[8]	-184.3	16.09	10.72	1.76%	-80.04%
83 Bi	金属	0.33	32.73	-53.6	文献[8]	-18.1	33.38	22.25	-1.19%	195.84%
90 Th	金属	0.285	53.31	-72.5	文献[10]	-10.2	68.77	45.85	-2.61%	607.40%
92 U	金属	0.191	142.3	2.4	文献[8] [17]	-4.0	263.82	175.88	0.40%	-160.46%
94 Pu	金属	0.15	62.5	-5.7	文献[8] [18]	-2.8	131.25	87.5	-0.20%	99.75%
PP	高分子	0.3989	3.06	119.5	文献[19]	-49.1	2.02	1.35	2.20%	-343.10%
PP	高分子	0.38	3.42	10.2	文献[20]	-40.6	2.46	1.64	1.22%	-125.11%
PC	高分子	0.4	4.11	10.2	文献[20]	-61.0	2.46	1.64	1.43%	-116.70%
花岗岩	岩石	0.2	50.28	0.9	文献[21]	-4.3	90.5	60.33	0.32%	-121.84%
TKX-50	离子盐	0.369	34.52	1.8	文献[22]	-33.3	27.13	18.09	0.92%	-105.52%

从表 1 可看出, 式(2)在物质的弹性段和实际值有较好的符合性, 75 种物质的最大误差分布符合 $[-0.54\%, 1.24\%]$ 的正态分布规律(见图 1), 说明式(2)的可靠性良好, 根据 6 西格玛原则, 式(2)的拟合精度可控制在 3.72% 以内。

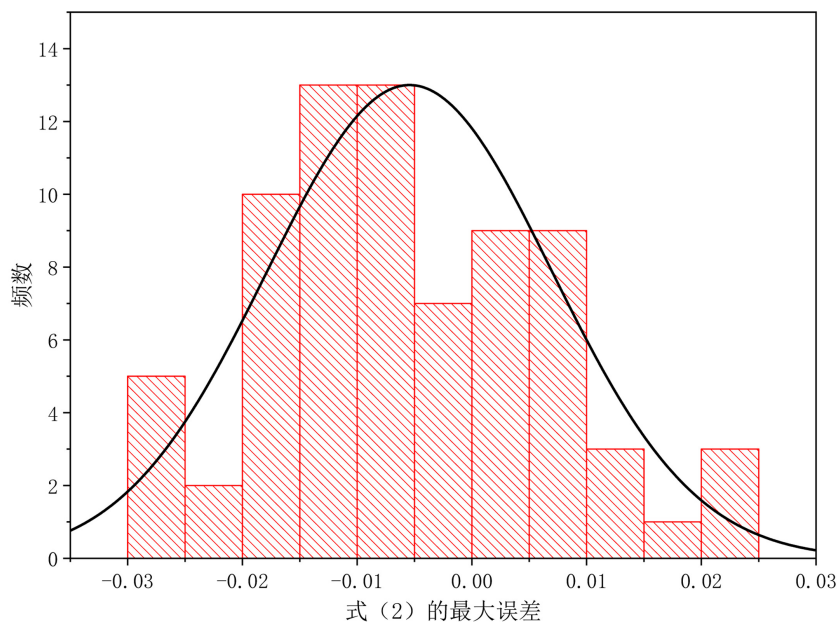


Figure 1. Maximum error distribution of equation (2)
图 1. 式(2)的最大误差分布图

拟合的最大误差 δ_{\max} 近似正态分布，也说明拟合误差主要来自于随机过程，本工作选取了金属、非金属单质、高分子、无机物四种不同形态的物质，其拟合误差没有明显的区别，也说明拟合误差不具有类同性。

3.2. 拟合最大误差和泊松比的关系

拟合的最大误差平均值 $\bar{\delta}_{\max}$ 的似乎和泊松比呈现 3 次方的统计关系(图 2 中的红色线)，相关系数 $R^2 = 0.8662$ ，最大误差的平均值 $\bar{\delta}_{\max}$ 在泊松比 $\nu_0 = 0.267$ 时有负的最小值。

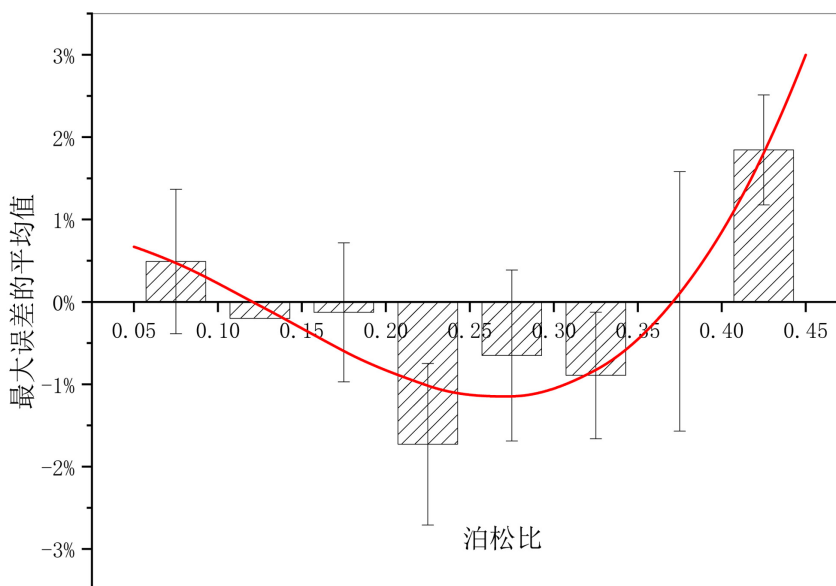


Figure 2. The correlation between Poisson's ratio and the mean maximum error
图 2. 泊松比和最大误差平均值的相关性

我们设 $P_{\max} = \varepsilon_{\max} E/3$ (式中 ε_{\max} 为弹性极限应变), 结合式(2)和(3), 可求得:

$$\frac{\partial \varepsilon_Y}{\partial \nu_0} = 2\varepsilon_{\max} - 3\varepsilon_{\max}^2 + \varepsilon_{\max}^3 \tag{5}$$

当 ε_{\max} 取定值时, 式(5)为常数, 因此在式(2)的模型下, 拟合的最大误差 δ_{\max} 和泊松比 ν_0 无关, 也就是说, 图 2 体现出来的最大误差 δ_{\max} 和泊松比 ν_0 的关系, 不是由于式(2)模型本身带来的。

从常规的力学理论上, 材料受力超过弹性极限后进入塑性阶段, 体积变化超越弹性阶段, 体现为式(2)的拟合值偏小是正常的。文献[16]以 $\nu_0 = 2/7 \approx 0.286$ 为界, 将泊松比和材料的脆韧性联系起来, 泊松比小于 0.286 的为脆性材料, 泊松比越小脆性越大, 泊松比大于 0.286 的为韧性材料, 泊松比越大韧性越大。泊松比 $\nu_0 \leq 0.1$ 的材料是脆性极大的材料(如铍、硼), 泊松比 $\nu_0 \geq 0.4$ 的材料是韧性极大材料(如铟、铊、高分子等), 这部分物质体现出式(2)的拟合值偏大的现象目前还无法解释。值得注意的是, 这些材料的物态数据来源年代均为上世纪六、七十年代, 由于脆性材料和韧性材料的弹性段均很小, 基于试验技术的迭代, 这些数据的精确性是值得怀疑的。

3.3. 拟合最大误差和 B'_0 的关系

表 1 列出了从文献数据导出的 $B'_0(W)$ 值和按式(4)计算的 $B'_0(J)$ 值, 按式(6)计算 B'_0 的相对差异 ϕ :

$$\phi = \frac{B'_0(W) - B'_0(J)}{B'_0(J)} \times 100\% \tag{6}$$

使用除去铍(4 Be)和金刚石(6C, d)的数据做图 3, 可看出, 式(2)拟合最大误差 δ_{\max} 和 B'_0 的相对差异 ϕ 呈较强的负相关性($R^2 = 0.8061$), 说明 B'_0 的相对差异是拟合误差的重要来源。

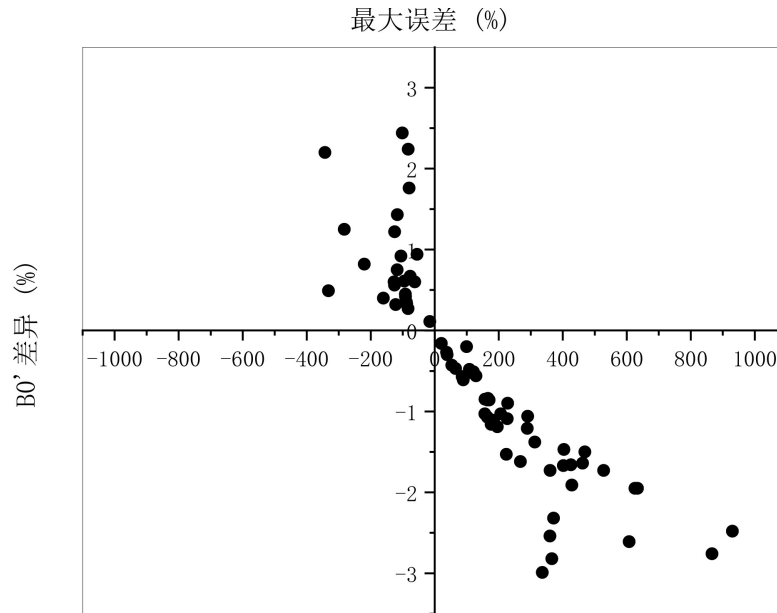


Figure 3. The correlation between ϕ and δ_{\max}

图 3. ϕ 和 δ_{\max} 的相关性

4. 结论

通过理想线弹性体的体积变化规律, 建立了一种新的等温物态方程, 对 75 种物质的文献数据进行了

验证, 得到以下结果:

1) 物质的材料力学参数和物态方程之间可以建立一种简洁的关系, 新的等温物态方程拟合结果有较好的准确性, 方程拟合精度可控制在 3.72% 以内。

2) 建立了理想线弹性体体积模量的一阶导数和泊松比的函数关系, 指出这两个参数有着深刻的内在联系。

3) 拟合的最大误差的分布符合正态分布, 说明误差来源于随机过程, 深入分析后认为 B'_0 的相对差异是误差产生的主要因素。

4) 拟合误差和物质的泊松比之间有统计关系, 这种关系不是拟合模型本身引起。

参考文献

- [1] 温原. 固态高分子等温物态方程的适用性[J]. 上海塑料, 2023, 51(1): 44-53.
- [2] Norman, E. 工程材料力学行为[M]. 北京: 机械工业出版社, 2016: 124-154.
- [3] 温原. 理想线弹性体的泊松比[J]. 力学研究, 2022, 11(2): 29-34.
- [4] Bridgman, P.W. (1958) *The Physics of High Pressure*. Bell and Sons Press, London.
- [5] 魏宇杰. 固体工程科学-工程材料的应用力学理论与实践[M]. 北京: 高等教育出版社, 2021: 16.
- [6] 许德美. 多晶 Be 的室温脆性研究[D]: [博士学位论文]. 沈阳: 东北大学, 2017.
- [7] 刘畅. 金刚石在复杂应变下的应力响应及物理性质[D]: [博士学位论文]. 长春: 吉林大学, 2020.
- [8] Gschneidner, K.A. (1964) *Physical Properties and Interrelationships of Metallic and Semimetallic Elements*. *Solid State Physics*, **16**, 275-426. [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60518-4](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60518-4)
- [9] Datchi, F., Dewaele, A., Godec, Y.L., et al. (2007) Equation of State of Cubic Boron Nitride at High Pressures and Temperatures. *Physical Review B*, **75**, Article ID: 214104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.214104>
- [10] Vaidya, S.N. and Kennedy, G.C. (1972) Compressibility of 22 Elemental Solids to 45 KB. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **33**, 1377-1389. [https://doi.org/10.1016/S0022-3697\(72\)80432-3](https://doi.org/10.1016/S0022-3697(72)80432-3)
- [11] Armentrout, M.M. and Kavner, A. (2015) A New High Pressure and Temperature Equation of State of Fcc Cobalt. *Journal of Applied Physics*, **118**, Article ID: 194904. <https://doi.org/10.1063/1.4935087>
- [12] Cynn, H., Klepeis, J.E., Yoo, C.S., et al. (2002) Osmium Has the Lowest Experimentally Determined Compressibility. *Physical Review Letters*, **88**, Article ID: 135701. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.135701>
- [13] Li, D., Jaglinski, T., Stone, D.S., et al. (2012) Temperature Insensitive Negative Poisson's Ratios in Isotropic Alloys Near a Morphotropic Phase Boundary. *Applied Physics Letters*, **101**, 823-837. <https://doi.org/10.1063/1.4772940>
- [14] Ma, C., Dou, Z.Y., Zhu, H.Y., et al. (2016) Structure Phase Transformation and Equation of State of Cerium Metal under Pressures Up to 51 GPa. *Chinese Physics B*, **25**, Article ID: 046401. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/25/4/046401>
- [15] Anzellini, S., Burakovsky, L., Turnbull, R., et al. (2021) P-V-T Equation of State of Iridium up to 80 GPa and 3100 K. *Crystals*, **11**, Article 452. <https://doi.org/10.3390/cryst11040452>
- [16] Christensen, R.M. (2022) Perspective on the Bond Bending and Bond Stretching Effects at the Atomic Scale and Their Relationship to Ductile Versus Brittle Materials Failure. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **167**, Article ID: 104984. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2022.104984>
- [17] 简单, 朱燮刚, 刘瑜, 等. U 和 UO₂ 状态方程研究进展[J]. 材料导报, 2021, 35(1): 82-95.
- [18] Barroso, D.E.G. (2015) Equation of State of Uranium and Plutonium. arXiv: 1502.00497.
- [19] 毛华杰, 何博, 郭巍, 等. 基于 LM-UGO 算法改性 PP 材料黏度模型与 PVT 模型拟合和试验验证[J]. 塑料科技, 2018, 46(12): 37-42.
- [20] 蔡天泽. 碳纤维增强聚合物的 PVT 特性及其在制品精度控制中的应用[D]: [硕士学位论文]. 北京: 北京化工大学, 2017.
- [21] 李干, 李杰, 宋春明, 等. 花岗岩的动态力学性能、本构模型与状态方程研究[J]. 力学与实践, 2023, 45(5): 952-959.
- [22] 周梦, 陶应奇, 周晓云, 等. 新型含能离子盐 TKX-50 状态方程及热力学性质的第一性原理研究[J/OL]. 计算物理: 1-8. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2011.O4.20230614.1058.002.html>, 2024-03-05.