

研究生教学用书

教育部学位管理与研究生教育司推荐

物态方程理论及计算概论

(第二版)

*Introduction to Theory and
Computation of Equations of State
(Second Edition)*

汤文辉 张若棋 编著



高等教育出版社

研究生教学用书

教育部学位管理与研究生教育司推荐

物态方程理论及计算概论

(第二版)

Introduction to Theory and
Computation of Equations of State

(Second Edition)

汤文辉 张若棋 编著



高等教育出版社

内容提要

本书介绍了物态方程的基本理论及计算方法,主要包括:物态方程的基本概念、经典气体的物态方程、量子理想气体的物态方程、固体的物态方程、液体的物态方程及计算、物质在超高压下的托马斯-费米物态方程、爆轰产物的物态方程、用雨果组数据计算固体的物态方程和物态方程的数值计算方法。附录给出了常用经验物态方程、物理常量和物性参量。全书内容丰富,概念清楚,语言简明易懂,可作为工程力学(爆炸力学)专业、凝聚态高压物理专业的研究生教材,也可供相关专业的科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

物态方程理论及计算概论/汤文辉,张若棋编著. —2
版. —北京:高等教育出版社, 2008. 1
ISBN 978-7-04-022937-0

I. 物… II. ①汤…②张… III. 物态-方程-
研究生-教材 IV. 0414. 12

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 169145 号

策划编辑	王超	责任编辑	张海雁	封面设计	李卫青
责任绘图	郝林	版式设计	陆瑞红	责任校对	金辉
责任印制	张泽业				

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-58581118
社址	北京市西城区德外大街4号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100011	网 址	http://www.hep.edu.cn
总机	010-58581000		http://www.hep.com.cn
		网上订购	http://www.landaco.com
经 销	蓝色畅想图书发行有限公司		http://www.landaco.com.cn
印 刷	北京市卫顺印刷厂	畅想教育	http://www.widedu.com
开 本	787×960 1/16	版 次	2008年1月第2版
印 张	20	印 次	2008年1月第1次印刷
字 数	340 000	定 价	31.70元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 22937-00

第二版前言

对于由大量微观粒子组成的宏观系统,即使已知全部微观粒子之间的相互作用,也无法写出全部的力学运动方程及其初始条件,也不可能求解这样的方程并由此得到系统的物理性质。一种行之有效的办法就是利用压强、温度、密度等宏观参量进行热力学描述,这些宏观热力学参量之间的关系就是物态方程。现在,物态方程作为描述物质热力学性质的基础理论,在强冲击载荷下的动力学响应、高温高压(包括超高温超高压极端条件)下的物性、材料物理、地球物理、天体物理以及核武器和常规武器的研制与武器毁伤效应研究和航天工程等方面具有广泛的应用。

本书自第一版(国防科技大学出版社,1999年)出版以来,受到了相关领域的科技工作者的欢迎,有不少学术论文把该书作为参考文献加以引用,同时也有不少单位将该书选为研究生教材。2005年,该书被教育部学位管理与研究生教育司推荐为“研究生教学用书”,这是广大读者和专家对作者极大的鼓励。

作为研究生教材,该书的主要使用对象是工程力学、高压物理等学科专业的学生。教学实践表明,学习这门课的研究生们往往具有不同的知识背景,对基础物理学知识的掌握程度参差不齐,因此,为了保证教学效果,需要更多地介绍一些统计物理学方面的基础知识。此外,自该书第一版出版以来,物态方程研究又有了若干新的进展。为适应新的形势的需要,作者对原书内容进行了全面修订和补充,使一些名词和提法更加规范,部分内容的条理更加清晰,对一些印刷错误进行了纠正。补充的主要内容包括:物态的概念(第1章),统计物理学基础(第2章),固体的膨胀(第4章),高压声速的计算、混合物固液相区物态方程模型(第8章),用于蒙特卡罗和分子动力学计算的势函数(第9章),流体动力学计算常用物态方程(附录),此外,还对第7章和第8章部分内容的编排顺序进行了调整。我们希望经过修订以后,该书将成为一本深入浅出并被研究生们喜欢的教材,同时又可为相关领域的科技工作者提供更有价值的参考。

在本书第二版修订过程中,冉宪文博士提供了9.4节的素材,陈平形副教授对第二章和第三章内容提出了宝贵意见。在第二版出版过程中,国防科技大学出版社无条件将该书版权转让给高等教育出版社,高等教育出版社的编辑同志给予了热情帮助。作者感谢为该书第二版的出版提

供了帮助和方便的所有个人和单位。

尽管作者尽了很大努力,但由于水平有限,书中难免存在不当之处,恳请广大读者批评指正。

作 者

2007 年 7 月

第一版序

物态方程是描述处于热力学平衡态物质系统中压强、温度和密度之间的关系式,也是物理学研究的一个基础问题。实际的物质系统是由多个粒子组成的,原则上讲只要知道该系统中粒子间的相互作用,就可以导出它的物态方程,从而了解该系统的宏观物理性质。

但是实际的物质系统是多样化的和复杂的,人们对多个粒子间相互作用的真实描述遇到了很大困难,因而为在这个领域耕耘的理论家和实验家留下了一片广阔天地。时至今日,他们已经构造出适用于某些相态和热力学状态区的、形式各异的物态方程模型,尽管它们的近似程度有待进一步改善,并留有一些处女地尚待未来科学家去开垦。从另一方面讲,通过对物质系统物态方程的研究,反过来又可深化对自然界物质运动本质的认识,从而提高人类改造世界的能力。涉及物态方程的应用领域很广,它包括惯性约束聚变、材料物理、武器物理、天体物理、地球及行星物理等有关高温高压极端条件下的物理学问题。

本书作者近年来一直从事物态方程的教学和科研工作。现在作者将国内外物态方程研究的主要成果和自己的研究成果与体会加以归纳和总结,编著成这本书,这是一件非常有意义的工作。

本书较系统地概述了物态方程的基本理论,所涉及对象包括经典气体、量子气体、固体、液体、爆轰产物以及超高压下的物质,叙述了应用动力学实验数据和数值模拟方法计算物态方程的基本方法。本书的主要特点是较全面地阐述了常用物态方程模型,突出物态方程的应用。全书层次分明,文字简练流畅,便于阅读。

我相信,本书对于相关专业的高年级大学生、研究生和在本领域从事研究工作的科技人员都有阅读和参考价值。

中国科学院院士
中国工程物理研究院研究员

经福谦

1999年10月于四川绵阳

第一版前言

物态方程从狭义上讲是联系热力学系统压强、体积、温度(或内能)关系的方程,它是物理学中的一个重要研究内容。

现代科学技术特别是物理学某些领域的发展,极大地促进了物态方程的研究。反过来,物态方程也为其他一些学科的发展起到了十分重要的作用。例如,物态方程不仅是核武器、航空航天技术等有关问题研究中必不可少的,而且在高压物理、天体物理、地球物理、等离子体物理等方面都有重要应用。

本书介绍的是物态方程的基本理论和计算方法。从理论上获得物态方程是从描述物质微观粒子的运动出发,建立物理模型,并利用统计物理学方法建立起压强、体积和温度等参数之间的普遍联系。物态方程的计算则是利用理论研究成果、实验测量结果及现代计算方法等计算出物质在不同状态下的宏观热力学性质,从而为更加深入的研究和工程设计提供依据。我们知道,物质按照其聚集状态可分为固态、液态、气态和等离子体态。不同聚集态的微观运动既有共同性规律,也有其特殊性。它们的共性主要表现在:微观粒子总是服从一定的统计分布规律,它们的特殊性则主要表现在粒子之间相互作用力的不同。不同的相互作用导致了物态方程的重要差别。虽然不同聚集状态的物态方程从原则上说都可利用统计原理获得,但在研究方法和所涉及的学科知识上却存在明显差别。有鉴于此,本书所主要涉及的物态是固、液、气态,所涉及的微观态仅限于原子分子层次。在编写过程中,作者力图由浅入深,深入浅出,在简明的原则下兼顾物态方程理论及计算的系统性,并尽可能反映出物态方程的最新研究成果。编写本书时,作者主要参考了两本著作,即徐锡申、张万箱等著的《实用物态方程理论导引》(科学出版社,1986),经福谦等著的《实验物态方程导引》(科学出版社,1986)。

在本书正式出版之际,中国科学院院士、中国工程物理研究院研究员经福谦先生为本书作序。在本书的写作与出版过程中,得到了蒋伯诚先生的热情帮助。于万瑞先生和张世泽先生在百忙中审阅了初稿并提出了宝贵意见。在出版过程中又得到了国防科技大学出版社的大力支持,作者谨此向以上个人和单位致以衷心的感谢!

由于物态方程理论及计算的内容十分广泛,而作者水平有限,所以书中难免存在错误和不妥之处,恳请读者批评指正。

作 者

1999 年 9 月

目 录

第 1 章	绪论	1
1.1	物态与物态方程	1
1.2	物态方程的发展历史与意义	5
1.3	物态方程的几个典型应用	6
1.4	物态方程的研究方法	10
	参考文献	11
第 2 章	经典气体的物态方程	12
2.1	统计物理学基础	12
2.2	经典气体的配分函数	24
2.3	经典理想气体的物态方程	27
2.4	经典实际气体的物态方程	46
2.5	离解与电离气体的物态方程	54
2.6	德拜 - 霍克方程	61
	参考文献	65
第 3 章	量子理想气体的物态方程	66
3.1	量子统计法	66
3.2	费米气体的物态方程	71
3.3	玻色气体的物态方程	80
	参考文献	85
第 4 章	固体的物态方程	86
4.1	概述	86
4.2	固体物态方程的一般形式	91
4.3	晶体的冷能和冷压	93
4.4	点阵的热能和热压	99
4.5	格临爱森系数	110
4.6	电子热运动对物态方程的贡献	121
	参考文献	123
第 5 章	液体的物态方程及计算	124
5.1	正常液体的两个近似模型	125
5.2	熔点和沸点的热力学讨论	132
5.3	LJD 理论	137
5.4	LJD 理论的几个应用	143

5.5	分布函数理论	152
5.6	固液气三态统一的物态方程形式	156
5.7	GRAY 三相物态方程	159
	参考文献	168
第 6 章	物质在超高压下的托马斯 - 费米物态方程	169
6.1	托马斯 - 费米模型	169
6.2	零温下的托马斯 - 费米方程	170
6.3	托马斯 - 费米 - 狄拉克方程	179
6.4	含温度的托马斯 - 费米方程	182
6.5	托马斯 - 费米方程的普适性	186
6.6	托马斯 - 费米方程的一级温度微扰	188
6.7	TFK 方程	191
	参考文献	194
第 7 章	爆轰产物的物态方程	195
7.1	引言	195
7.2	凝聚炸药爆轰产物的基本性质	195
7.3	爆轰产物的物态方程	200
7.4	爆轰产物物态方程的计算	205
	参考文献	209
第 8 章	用雨果纽数据计算固体物态方程	210
8.1	状态区域的划分	210
8.2	正常区物态方程的计算	212
8.3	等熵方程	230
8.4	冲击温度的计算	237
8.5	高压声速的计算	239
8.6	混合物的物态方程	240
8.7	固体膨胀时的物态方程	245
8.8	多孔材料的物态方程	247
	参考文献	252
第 9 章	物态方程的数值计算方法	254
9.1	计算物态方程的能带论方法	254
9.2	计算物态方程的蒙特卡罗方法	259
9.3	计算物态方程的分子动力学方法	263
9.4	蒙特卡罗和分子动力学计算中的势函数	265
9.5	托马斯 - 费米方程的数值计算方法	272
	参考文献	276
附 录		278
I	常用经验物态方程	278

II 常用物理常量	288
III 物理量的单位	289
IV 物质的物性常量	290
参考文献	304
人名译名对照表	305

第 1 章 绪 论

1.1 物态与物态方程

1.1.1 什么是物态

物质世界,丰富多彩,千姿百态,那么到底什么是物态?

科学实验已经证明,物质都是由不同层次的微观粒子组成的。例如,常见物质都是由分子组成的,而分子又是由原子组成的……当大量的微观粒子在一定的温度和压强下相互聚集为一种稳定的状态时,就叫做“物质的一种状态”,简称物态。一般说来,任何一种物质,在不同的温度、压强以及外场(如引力场、电场、磁场等)的影响下,将呈现不同的物态。在热力学中,把物质系统内每一个在物理性质上均匀,并和其他部分有一定分界面隔开的部分称为“相”。因此,一种物质在同一种物态下,可以有多种不同的相。例如,固态水被认为有七种不同的结晶状态,分别称为冰 I、冰 II、……、冰 VII,除冰 IV 很不稳定外,其余各固态水都可在较高压强下稳定存在,它们都是冰 I 的异形体。

从物质的宏观特征进行区别,通常可划分为固态、液态和气态三种物态。但从物质内部结构来考虑,就远不只三态了。有些固体,内部分子或原子的排列是规则的,具有周期性和对称性,这种状态称为结晶态。另一些固体,如玻璃、塑料、沥青等,虽然在常温下有固定的体积和外形,但内部结构更像液体,称为非晶态或玻璃态。一些有机物质,既具有流动性,又具有类似晶体的光学性质,介于液态和晶态之间,称为液晶态或介晶态。气态物质被加热到万摄氏度以上高温,原子发生电离,整个气体变成由带正电的离子和带负电的电子组成的集合体,这两种带电粒子的聚集状态叫等离子态。在极低温下,一些液体(如液态氦)的粘性完全消失,成为超流态。某些物质在极低温时的直流电阻趋于零,这种状态称为超导态。在巨大的压强作用下,氢可以转变成具有金属特性的固态,称为金属氢态。

以上是日常生活或实验室里能够得到的物态。随着压强和温度的进一步提高,还会有其他一些物态出现。例如,宇宙中的白矮星是一种质量

很大而体积很小的恒星,内部有很大的压强和很高的温度,以至于所有电子都脱离了原子核而成为自由电子,失去全部电子的原子核像晶体一样高度紧密、规则地排列起来,自由电子则在其间混乱地运动着,这种物态称为超固态(密度非常高)。还有一种叫“中子星”的星体,其内部压强和温度比白矮星还要高得多。强大的压强把核外电子都压进原子核中与质子结合成为中子,这种高密度物态称为中子态。科学研究表明,可能还有更高密度的物态存在,这就是黑洞、超子态等。此外,高能物理实验已发现了大量反粒子,因此还可能存在由反粒子构成的所谓反物质态。

总之,从物质内部结构特征来看,物态的种类是很多的。随着科学技术的发展,人们对宇宙物质及其物态的认识必将越来越深刻,视野越来越宽广。

当然,这里所说的物态是广义的,即大量微观粒子在一定温度和压强下所聚集的任何一种稳定状态,都被称为一种物态。然而,人们至今还不能描绘出包括一切物态的完整相图,即使对最熟悉的物质也是这样。但从物态随压强 P 和温度 T 而变化的特点来考虑,可以设想出一个如图 1.1 所示的 $P-T$ 相图^[1]。在图 1.1 中特别需要说明的是,由于温度是微观粒子热运动平均动能的标志,而真空中没有粒子的热运动,所以 $P-T$ 相图的原点代表了真空态。

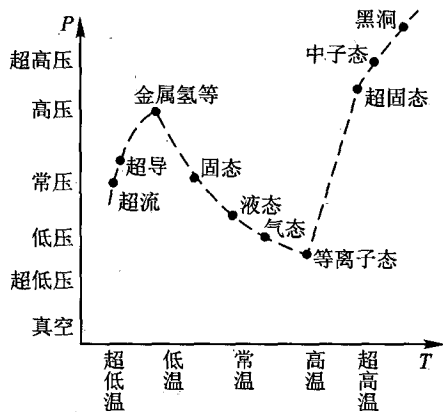


图 1.1 设想的物态总图

1.1.2 什么是物态方程

物态方程中的物态是指热力学意义上的物态。

热力学与统计物理学所研究的对象是由大量微观粒子组成的系统,称为热力学系统,简称为系统。热力学系统的宏观性质是大量微观粒子运动的统计表现。系统的一切宏观性质的总和称为这个系统的宏观状态。宏观性质包括力学性质、电学性质、磁学性质,也包括热学性质、化学性质及其他物理性质。

为了对热力学系统的宏观性质进行描述,热力学中的物态是一种特殊的宏观状态,即均匀系统的热力学平衡态,简称为平衡态。

当系统内部以及系统与环境之间没有任何未被平衡的力时,则说该系统处于力学平衡态。一个处于力学平衡的系统,如果不发生内在的自发变化(如化学变化)或物质从系统的一部分向另一部分的转移(如扩散、溶解),即使是缓慢的变化或转移也不发生,则说该系统处于化学平衡态。若一个处于力学平衡和化学平衡的系统由绝热壁与环境隔开,且系统的宏观状态量不发生变化,则称系统处于热平衡。热平衡时,系统各部分的温度相同。当以上三种平衡条件都满足时,则说系统处于热力学平衡态。

大量实验事实表明,对于孤立系统或处在恒定外力场(如重力场、静电场,等等)中的热力学系统,经过足够长的时间后,总要自发地趋于平衡态。这个平衡态的特征是:系统中的一切宏观变化停止,系统的所有宏观性质都不随时间变化。已达到平衡态的系统,将一直停留在这个状态上,要破坏这个平衡态,必须有外来作用。

当一个系统处于平衡态时,其宏观性质不随时间变化,所以可引进一组描述宏观性质的热力学参量来描写系统的状态。描写系统宏观性质的常用参量有压强、温度、体积等。描写系统宏观性质的独立参量的数目称为系统的自由度。当然,独立参量的选取是任意的。因此,热力学中的物态是由压强、温度、体积等参量所决定的热力学平衡态,与前面提到的广义物态是有所不同的。

简单地说,物态方程是描写均匀物质系统平衡态宏观性质的状态参量之间的关系式。在一般情况下,物态方程就是指压强 P 、温度 T (或内能 E)和体积 V (在物态方程的实际计算中常用比体积或密度)之间的函数关系。由于系统处于平衡态时具有确定的状态参量,或者说,其状态可由一组独立的状态参量来描述,因此,更加严格地说,物态方程是指描述均匀系统平衡态宏观性质的独立参量与其他状态参量之间的函数关系。需要注意的是,对于不处于热力学平衡态的系统,物态方程是根本不存在的。这时在原则上可将系统划分为若干小的部分,且每个小的部分都是包含了大量分子的一个宏观系统,若每个小的部分都达到或近似达到了

热力学平衡,则可对每个小的部分分别采用物态方程来描述其热力学参量之间的关系。

大家所熟知的理想气体的物态方程为

$$PV = \nu RT \quad (1.1.1)$$

式中 ν 为气体的物质的量, R 为普适气体常量。假定 P 和 V 为独立参量,则上式给出了温度 T 与这两个独立参量之间的函数关系。

一般地,形如

$$P = P(V, T) \quad (1.1.2)$$

的物态方程,称为压强方程或热物态方程,例如式(1.1.1)。形如

$$E = E(V, T) \quad (1.1.3)$$

的物态方程,称为能量方程,其中 E 为系统的内能。而方程

$$P = P(V, E) \quad (1.1.4)$$

常被称为力学物态方程。

从热力学知,描述热力学系统的状态参量一般有四类,即几何参量(例如体积),力学参量(例如压强),化学参量(例如浓度)和场参量(例如电场强度和磁场强度等)。但是,物态方程中经常出现一个不属于上述四类参量中任何一类的参量,这个量就是温度。温度是研究热现象时引入的,它表示系统的冷热程度。由于上述四类参量已完全确定了系统的状态,所以温度并不是一个新的独立参量,而是上述四类参量的函数。在式(1.1.2)—(1.1.4)所示物态方程中,只含有几何参量和力学参量及温度,因此它们只适合于比较简单的系统。若要考虑化学组成的影响,在上述物态方程中还需包含化学变量。同样的道理,若要考虑外场的作用,物态方程中还应包含场变量。

从某一物态方程出发,如果只能得到系统的部分热力学性质,这样的物态方程称为不完全物态方程;反之,若可以得到系统的全部热力学性质,这样的物态方程称为完全物态方程。事实上,大多数有实用价值的物态方程都是不完全物态方程,而完全物态方程仅仅只有四个,它们是在各自的特定自变量之下的热力学特性函数,即内能 $E(V, S)$, 焓 $H(P, S)$, 自由能 $F(V, T)$, 吉布斯函数 $G(P, T)$ 。

应该指出,物态方程反映了一种物质系统与其他系统相区别的独特性质,因此,它只能由实验或由以大量原子分子为研究对象的统计物理给出。热力学给出的是以普遍的自然规律为基础的普遍理论,这些普遍理论并不能描述某种具体物质与其他物质相区别的行为,所以物态方程不是热力学的理论推论,而是对热力学的一种实验或理论补充。从实验的角度看,物态方程是实验规律的总结,表达的是实验结果,因而适用于相

应的实验范围,并具有与相应实验相同的精度。一旦超出了实验范围,物态方程可能会有不同的形式和精度。从理论的角度看,首先需要对系统中的原子或分子的行为进行描述,然后运用统计物理原理得到描述平衡系统热力学性质的物态方程。由于统计物理是普适的,所以理论物态方程的可靠性与适用范围与在描述原子分子运动时所作出的各种物理假设(模型)相关。

为了满足研究各种自然现象的需要,要求物态方程所涉及的压强从很小的数值甚至负压(拉伸状态)一直扩展到约 10^5 GPa 甚至更高。然而,要在一个如此宽广的范围内用一个简单的方程来描述物质的全部行为是不可能的,这是由于在不同的范围内,原子分子之间的相互作用存在很大的差别,因而需要采用不同的模型假设来描述。通常的做法是按固、液、气等不同的物态,分别对原子分子的运动进行描述,并以此为基础给出与不同物态相适应的物态方程形式。

需要说明的是,物态方程所直接描述的是各向同性且均匀的系统的性质,这种各向同性且均匀的系统实际上是理想流体。因此,当把物态方程应用于固体时需要小心谨慎。一般认为,高温高压下的固体可近似当作流体处理,物态方程可直接使用。但在较低压强下,由于固体的结构和强度对固体的形变有着不可忽略的影响,因而物态方程是不足以描述其性质的,这时需要将物态方程和本构方程联合起来才能对物质的性质作出合理的描述。

1.2 物态方程的发展历史与意义

人类关于物态方程的研究可以追溯到很早的年代。早在 1662 年和 1679 年,英国化学家玻意耳和法国物理学家马略特就分别提出了描述理想气体性质的物态方程。描述真实气体的范德瓦耳斯物态方程则建立于 1873 年。但是,物态方程的系统理论和实验技术大都是 20 世纪建立并完善起来的。

1919 年,萨哈提出了描述稀薄电离气体的物态方程,四年之后,德拜和霍克提出了考虑带电粒子之间库仑相互作用的理论,使电离气体的物态方程趋于完善。1937 年,迈耶及其合作者提出了描述经典实际气体的集团展开法。1938 年,该方法又被推广到量子气体。20 世纪 50 年代末,李政道和杨振宁^[2]完善了量子气体的集团展开法。

1926 年,格临爱森从晶格动力学出发,提出了固体的物态方程理论。1927 年,托马斯和费米为解决重原子的电荷密度分布,提出了原子的统

计模型,这一模型一直是人们研究物质超高压物态方程的重要方法。

物态方程研究的另一个重要方面是实验测量。物态方程的主要实验研究手段是在20世纪建立起来的。20世纪20年代,布里奇曼^[3]在静高压技术方面做了大量工作,并在大量静压实验数据的基础上总结出了等温压缩的经验关系式(压强在20~30 GPa以下)。20世纪40年代之后,随着炸药和气体炮等动高压加载技术的迅速发展,特别是在第二次世界大战的推动下,物态方程的动态实验技术和探测手段获得了飞跃性的发展并基本趋于完善^[4]。

物态方程之所以能在较短的时间里获得相当大的发展,是因为它在自然科学以及工程技术中都有非常重要的地位。回顾历史可以发现:理想气体的物态方程是化学动力学中最早的定量描述,同时也是热力学和统计物理学的起源。分子相互作用的定量描述则起始于范德瓦耳斯方程。另一方面,自然科学和工程技术中的大量实际问题,例如天体演化、恒星和地球的内部结构、核聚变以及武器系统的设计及其破坏效应等,均涉及物质处于高温高压、超高温超高压下所发生的过程或现象,要对这些过程或现象进行研究,均离不开物态方程。当然,也正是这些实际问题的需要,再加上现代自然科学和实验技术的发展,推动或拓宽了物态方程的研究。

1.3 物态方程的几个典型应用

1.3.1 热力学

物态方程在热力学(包括热物性学)中的应用是非常广泛的,也是必不可少的。例如内能 E 和熵 S 等热力学量,它们是实验难以直接测量的,因此一般需要利用物态方程(再加上热容的实验数据)才能计算出来:

$$TdS = C_V dT + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V dV \quad (1.3.1)$$

$$dE = C_V dT + \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad (1.3.2)$$

其中 C_V 为定容热容。

又如,热膨胀系数 α 和等温压缩系数 κ_T 等热物性参量,尽管它们可通过一定的实验直接测量,但状态条件一旦发生变化,实验测量将变得非常复杂。但若已知物态方程 $f(P, V, T) = 0$,则根据定义: