УДАРНО-ВОЛНОВОЕ СЖАТИЕ СИЛЬНОНЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ МЕТАЛЛОВ И ЕЕ ТЕРМОДИНАМИКА

В. К. Грязнов^{а*}, М. В. Жерноклетов^b, И. Л. Иосилевский^{c†}, Г. В. Симаков^b,

Р. Ф. Трунин^b, Л. И. Трусов^b, В. Е. Фортов^a

 ^а Институт проблем химической физики Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия
 ^b Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики

607200, Саров, Нижегородская обл., Россия ^с Московский физико-технический институт

141200, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 12 марта 1998 г.

На основе экспериментов по сжатию и разогребу плотной плазмы металлов мощными ударными волнами анализируются влияние сильного коллективного кулоновского взаимодействия в дискретном и непрерывном спектрах, роль короткодействующего отталкивания, а также влияние вырождения на уравнение состояния плотной неидеальной плазмы металлов. Для генерации плазмы в широких диапазонах степеней ионизации, параметров неидеальности и вырождения применены взрывные устройства. С целью увеличения эффектов необратимой диссипации энергии использованы металлические мишени пониженной плотности. Результаты термодинамических измерений сопоставляются с теоретическими моделями, учитывающими кулоновское взаимодействие, короткодействующее отталкивание и вырождения электронной компоненты. Показана применимость плазмы в широкой и нетралиционной для физики плазмы области фазовой диаграммы с экстремально высокими параметрами ($T \ge 10^4$ K, $P \ge 10$ ГПа, $\rho = (0.1-1)\rho_0$).

1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени физические свойства плазмы, поддаются теоретическому описанию в предельных случаях высоких температур и (или) ультравысоких плотностей, когда плазменное межчастичное взаимодействие мало, что позволяет использовать классические (больцмановский тип статистики) [1] или квазиклассические (статистика Ферми) методы самосогласованного поля [2]. Промежуточная между этими асимптотиками область параметров характеризуется большой неопределенностью теоретических предсказаний, но в то же время представляет повышенный прагматический интерес [3] с точки зрения энергетических (инерционный термоядерный синтез, МГД-генераторы и т.п.), астрофизических (структура планет-гигантов, коричневых карликов и т.п.) и специальных приложений. Поэтому одной из наиболее трудных и интересных проблем современной физики плазмы представляется изучение ее физических свойств в условиях сильного коллективного межчастичного взаимодействия,

[†]E-mail: ilios@orc.ru

^{*}E-mail: grvk@ficp.ac.ru

которое затрудняет применение стандартных теоретических методов (теории возмущений, методов машинного эксперимента и т.п.) и требует в физическом эксперименте генерации экстремально высоких концентраций тепловой энергии [4]. Особый интерес представляет экспериментальный поиск плазменных фазовых переходов, предсказанных в неидеальной плазме на основе эвристических моделей и найденных недавно в пылевой и коллоидной плазме [5]. К настоящему времени основной объем экспериментальной информации по свойствам сильнонеидеальной плазмы получен динамическими методами [4,6], использующими технику мощных ударных волн для сжатия и необратимого разогрева вещества. Применение в такого рода опытах взрывных и пневматических метательных устройств позволило провести изучение и анализ теоретических моделей термодинамических, электрофизических и оптических свойств неидеальной плазмы цезия, инертных газов и водорода в условиях сильной неидеальности ($\Gamma_D = \sqrt{4\pi (e^2/k_BT)^3 \sum n_{\alpha} Z_{\alpha}} = 0.1-5$ — параметр кулоновского взаимодействия), когда $n_e \lambda_e^3 \leq 0.1$ ($\lambda_e = \sqrt{2\pi \hbar^2/m_e k_B T}$ — де-бройлевская длина волны электрона), электронный газ подчиняется статистике Больцмана, а кратность ионизации $\alpha = n_e/(n_a + n_i)$ такой плазмы не превышает 1-2. Выход за рамки этих условий — переход к многократно ионизованной и частично вырожденной плазме — может быть осуществлен путем привлечения экспериментальных данных по сжатию сплошных и пористых металлов ударными волнами с амплитудным давлением в сотни тысячмиллионы атмосфер. К настоящему времени получен значительный объем экспериментальных данных по динамическому сжатию металлов (см. компендиумы [7–9] и содержащиеся там ссылки) с использованием ударных волн, генерируемых взрывом химических [6, 10, 11] и ядерных [12] взрывчатых веществ (ВВ), пневматическими метательными устройствами [13], а в последнее время — концентрированными лазерными [14], рентгеновскими [15] и ионными [16] потоками.

Данные по ударно-волновому сжатию, дополненные результатами регистрации адиабат разгрузки ударно-сжатых металлов, составляют основу для конструирования полуэмпирических уравнений состояния [17] путем оптимального выбора констант в функциональных термодинамических соотношениях, основанных на упрощенных термодинамических моделях. Вместе с тем в процессе ударного сжатия уже при относительно невысоких (100-200 ГПа) давлениях происходит плавление, а затем — прогрессирующая термическая ионизация и ионизация вещества давлением. Таким образом. реализуется плотная неупорядоченная многократно ионизованная система заряженных частиц — электронно-ионная плазма со сложным спектром интенсивных коллективных взаимодействий. По этой причине ударно-сжатая плазма металлов представляется интересным объектом для проверки теоретических моделей плазмы как с точки зрения поиска плазменных фазовых переходов [18], так и для анализа различных моделей описания плазменной неидеальности в дискретном и непрерывном спектрах, влияния связанных электронов и типа их статистики на термодинамику плазмы при высоких концентрациях энергии. По существу речь идет о распространении плазменных моделей [19] на нетрадиционную для них область конденсированных плотностей и мегабарных давлений, где до последнего времени применялись либо полуэмпирические аппроксимационные уравнения состояния [17], либо далекие экстраполяции квазиклассических приближений [20]. Наличие такого рода термодинамических измерений в области перехода «металл-диэлектрик» позволило бы, кроме того, проверить гипотезу [21] о связи металлизации с фазовым превращением первого рода в неупорядоченных средах.

В данной работе приведены результаты экспериментов по генерации неидеальной

плазмы меди, никеля и железа путем сжатия и необратимого разогрева пористых образцов во фронте мощных ударных волн, генерируемых плоскими либо сферически сходящимися ударными волнами. Регистрация скоростей движения ударных волн в исследуемых и эталонных образцах позволяет, используя законы сохранения массы, импульса и энергии, найти термодинамические параметры ударно-сжатой плазмы и сопоставить их с расчетами по теоретическим моделям неидеальной многокомпонентной плазмы.

2. ГЕНЕРАЦИЯ И ДИАГНОСТИКА ПЛАЗМЫ

Интересующий нас диапазон параметров сильнонеидеальной плазмы соответствует пониженным по сравнению с твердотельными значениям плотности ρ_0 и энергиям, превосходящим энергию связи атомов и молекул в твердом теле (~ 1 эВ на частицу). Для генерации таких состояний металлов использовалось ударно-волновое сжатие мелкодисперсных (пористых) металлов, что дает возможность увеличить эффекты необратимой диссипации энергии во фронте ударного разрыва и получить более высокие разогревы плазмы. Исследовались порошки соответствующих металлов с содержанием основного элемента не менее 99.5%. Образцы представляли собой спрессованные (или полученные по специальной технологии из гидридов исследуемых металлов) до требуемой в эксперименте плотности цилиндрические таблетки с отношением диаметра к толщине > 2.5. Последняя величина определялась необходимостью исключения влияния на фронт ударной волны возмущений, распространяющихся с боковой поверхности мишени. Образцы сравнительно небольшой пористости $1 < m = \rho_0/\rho_{00} < 4$ (ρ_0 — исходная кристаллическая плотность, ρ_{00} — плотность образца) получали прессованием порошка в специальных формах или, при $m \ge 4$, непосредственно в капсуле измерительного устройства. Размер отдельных частиц порошка составлял менее 100 мкм и варьировался в ряде экспериментов для оценки его влияния, которое в наших условиях было мало. Более высокую (4 < m < 8) пористость получали из порошка гидрида исследуемого металла с последующим его дегидрированием. Образцы с максимальной пористостью (т > 8) изготавливались с использованием мелкодисперсного порошка с размерами отдельных зерен в несколько (2-3) сотен ангстрем по технологии, основанной на смыве высокоскоростной струей гелия мельчайших частиц с поверхности расплавленного металла. Проводился контроль за содержанием окисных примесей в порошках. Во всех случаях они не превосходили долей процента. Размер частиц порошка выбирался с учетом условия обеспечения равномерного прогрева зерен. Это обстоятельство, а также технологические возможности ограничивали величину пористости в наших экспериментах величиной $m \leq 20$.

Динамические методы диагностики ударно-сжатых состояний основаны на использовании законов сохранения массы, импульса и энергии на фронте плоского стационарного ударного разрыва [10]:

$$V = \rho^{-1} = \frac{D - U}{\rho_{00}D}, \quad P = \rho_{00}DU, \quad E = E_0 + \frac{U^2}{2}.$$
 (1)

Измерение в эксперименте значений волновых D и массовых U скоростей дает возможность определить термодинамические функции: давление P, удельный объем V и удельную внутреннюю энергию E ударно-сжатого вещества.



Рис. 1



Рис. 1. Схема контактного нагружающего устройства: 1 — линза ВВ; 2 — инертная выравнивающая подставка; 3 — цилиндрический заряд ВВ; 4 — ударник; 5 — экран; 6 — исследуемые образцы; 7 — электроконтакты; 8 — воздушный зазор (5 мм)

Рис. 2. Схема метательного генератора ударных волн: 1-7 — то же, что и на рис. 1, 8 — стальной диск

Регистрация волновых скоростей в пористых мишенях, представляющих собой таблетки толщиной 3-4 мм, проводилась электроконтактным методом. При этом, начиная с давлений 10 ГПа и выше, использовались изолированные датчики диаметром 0.14 мм из проволоки ПЭЛ-14. При меньших давлениях, когда такие датчики работают недостаточно устойчиво, измерения проводились с использованием пьезокерамических отметчиков времени. Используемые взрывные измерительные устройства и выбранная геометрия расположения датчиков позволяли фиксировать значения волновых скоростей с точностью 1–1.5% и, кроме того, контролировать симметрию ударной волны в образцах по разновременности срабатывания датчиков, расположенных на одном уровне (в одной плоскости).

В опытах использовался набор взрывных генераторов трех типов. На первом из них, представляющем так называемые контактные измерительные устройства [22], получены наиболее низкие параметры сжатия исследуемых пористых металлов. Схематически одно из таких устройств изображено на рис. 1. При выходе на свободную поверхность плоского фронта детонационной волны продукты взрыва, «мягко» расширяясь в



Рис. 3. Схема кумулятивного генератора ударных волн сферической геометрии: 1 полусферический заряд BB; 2— стальная оболочка; 3— алюминиевый экран; 4 исследуемые образцы; 5— электроконтакты

воздушный зазор, тормозятся о металлическую пластину-ударник, создавая в ней квазистационарную волну. При этом скорость движения ударника становится примерно постоянной. Вариации состава и высоты (массы) заряда взрывчатого вещества позволяют получать данные по сжатию исследуемых пористых металлов в достаточно широком диапазоне давлений.

Давления ударных волн в экранах другого типа устройств получаются ударом по ним сравнительно тонких металлических (алюминий, железо) пластин (толщиной в 1.5-4.0 мм), разогнанных до скоростей в 4.0-6.5 км/с. Схема подобного устройства приведена на рис. 2. В этом устройстве продуктами детонации разгоняется алюминиевый ударник толщиной 4 мм [23], впрессованный в стальной диск той же толщины. Детонационная волна, выходя на границу с металлом, создает в стальном диске более высокие давления, чем в алюминии, тем самым осуществляется подпор краев алюминиевого диска и выравнивание летящего ударника. В других подобных устройствах в качестве ударника использовались стальные пластины толщиной от 1.5 до 2.2 мм. Давления в системах этого типа примерно вдвое превосходят параметры, полученные в плоских контактных (рис. 1, 2) устройствах. Максимальные давления созданы на установках, в которых использован принцип сферического схождения ударника («оболочки»), разгоняемого продуктами взрыва сходящейся детонационной волны [12, 24]. На рис. 3 показана схема такого кумулятивного устройства. Ударником здесь служит стальная оболочка толщиной ~ 3 мм, которая по мере своего «схождения» к центру непрерывно увеличивает скорость. Располагая мишень с исследуемыми образцами на различных радиусах устройства, можно получать в них различные давления. Спецификой этих устройств является нестационарность ударно-волнового процесса, связанная со сферическим движением. Это приводит к необходимости введения небольших (порядка 1%) расчетных поправок, учитывающих разный закон ее схождения в экране и образце.

Во всех рассмотренных устройствах в качестве экранов использовался алюминий. Это связано с тем, что его ударная адиабата в P - U-плоскости (где в соответствии с методом отражения [25] и решается задача о распаде разрыва на границе экран образец) располагается вблизи адиабат пористых металлов и, как показано в [26], в этом случае при отыскании параметров сжатия в исследуемых порошках можно пользоваться зеркальным (в *P* – *U*-плоскости) отображением ударной адиабаты. Это существенно упрощает нахождение массовой скорости за фронтом ударной волны и других параметров ударно-волнового сжатия, делая их более определенными и надежными. По принятому способу обработки результатов опытов каждое значение волновой скорости, зафиксированное на конкретном измерительном устройстве, является средней величиной из трех-восьми отдельных независимых регистраций (максимальное число опытов выполнялось при наибольших давлениях ударного сжатия) волновых скоростей. Поэтому среднеквадратичная ошибка среднего значения волновой скорости во всех сериях опытов не превосходила 1–1.5%. Той же величиной погрешности характеризуется и значение массовой скорости в исследуемом веществе. Погрешность в определении степени сжатия

$$\Delta \sigma = \Delta(\rho/\rho_{00}) = \sigma(m\sigma - 1) \left(|\Delta D/D| + |\Delta U/U| \right)$$

растет с увеличением m и σ и становится особенно большой при максимальных m, несмотря на то что в этом случае происходит частичная компенсация ошибки за счет перехода к области состояний, отвечающих $\sigma < 1$.

Тем не менее, судя по взаимной согласованности многочисленных экспериментальных данных для многих различных веществ, наиболее вероятные экспериментальные значения определены достаточно точно. Это относится и к области самых малых из исследованных давлений, особенно чувствительных к погрешностям определения D и U.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ИХ АНАЛИЗ

Проведенные измерения ставили своей целью получение экспериментальных данных о сжимаемости пористых образцов в неисследованной для этих металлов области состояний плазмы: для никеля — это максимально возможные пористости (m = 15 и 20) и давления ударного сжатия более 50 ГПа, что существенно превосходит данные работ [27, 28]; для меди получены данные для высоких пористостей m = 10, превосходящие результаты [27, 29]. Кроме того, выполнены измерения сжимаемости для образцов пористостью m = 7.2 с размерами частиц в 100 Å для сравнения с прежними [27] измерениями, выполненными с размерами частиц порядка 100 мкм. Для железа полученные результаты ударного сжатия образцов с m = 5, 10 и 20 будут сопоставляться и анализироваться совместно с данными [27].

Прежде чем перейти к анализу полученных результатов, напомним, что в [27, 28] были проведены специальные методические опыты по исследованию возможного влияния влажности образцов, их толщины, наличия воздуха и размера частичек порошка на результаты измерений. Проводилось прямое сопоставление опытов: с прокаленным порошком (изолированным от окружающего воздуха) и порошком, изготовленным в обычной атмосфере; с образцами, из которых откачен воздух; с образцами, толщины которых отличаются друг от друга на порядок, а также с вариацией размеров частиц в 20–30 раз. Было показано, что в пределах взаимной погрешности данные методических опытов совпадают с опытами основных серий. Это позволило в настоящей работе ограничиться лишь проведением измерений по выяснению влияния размера зерен порошка. Все вновь полученные данные приведены в табл. 1. Для никеля и меди они сопоставлены с результатами прежних измерений [27, 28] на рис. 4 в D - U-координатах.



Рис. 4. *D*-*U*-диаграммы меди, никеля и железа

Из сопоставлений следует, что данные для плазмы меди, полученные для образцов, отличающихся по размерам частиц в 10000 раз (для m = 7.2), совпадают. Отсюда можно сделать вывод, что ширина фронта ударной волны, возможно связанная с размерами отдельных частичек, в данном случае не влияет заметно на результаты эксперимента и делает их интерпретацию более определенной. Для никеля новые экспериментальные точки логично располагаются на продолжении соответствующих ударных адиабат, полученных ранее для меньших давлений. Совокупность измерений, представленных на рисунках, подтверждает выводы [28], характерные, как это теперь видно, не только для никеля, но и для меди, железа и, по-видимому, для всех других исследованных металлов.

Общим является следующее.

1. Начальные участки адиабат представляют собой расходящийся веер прямых разного наклона, сходящихся к одной общей точке (или малому отрезку ΔD) на оси ординат (при U = 0), которая отстоит от начала координат на величину в 100–200 м/с. Возможно, что эта величина соответствует скорости звука в воздухе, сниженной за счет металлических частиц, что для адиабат образцов с высокой пористостью вполне объяснимо. Трудности такой гипотезы возникают при анализе положения зависимостей D(U) для адиабат образцов малой пористости, когда интерполяция их начальных участков к оси координат также не противоречит высказанному предположению.

2. Наклон адиабат dD/dU на начальном участке изменяется в широких пределах примерно от 3 (никель, m = 1.1) до 1.1 (m = 20). Наклоны вторых участков меняются дважды (для адиабат Cu и Ni c m = 10 и 20 это показано экспериментально): первый раз в области сравнительно небольших волновых скоростей D < 8 км/с (для никеля от 1.7 для малых σ до 1.4 для больших) и второй — переход к наклону, примерно соответствующему теоретическому наклону адиабат, вычисленному, например, по модели

Таблица 1

Эксперимент							Теория (15)–(24)						
M	D, км/с	U, км/с	Р, кбар	ρ, г/см ³	Н, кДж/г	ρ, г/см ³	Т, К	Н, кДж/г					
Никель													
15	11.5	9.36 9.74	637 516	3.18	56.65	3.08	53300	56.97					
20	Mary												
медь													
7.2	1.21	1.00	15	7.15	-4.57	9.61	4680	-4.6					
7.2	1.88	1.58	37	7.86	-3.55	8.71	5796	-3.58					
7.2	2.3	1.92	55	7.58	-2.7	8.03	6803	-2.72					
7.2	2.91	2.40	87	7.08	-1.158	6.99	8835	-1.15					
7.2	3.40	2.75	120	6.49	0.482	6.18	11248	0.527					
7.2	5.25	4.04	263	5.38	7.767	5.27	19616	7.81					
7.2	6.33	4.79	376	5.09	1.36	5.26	24511	1.35					
7.2	7.09	5.31	467	4.94	18.3	5.27	28065	18.0					
10	1.21	1.01	10.9	5.30	-4.57	9.57	4680	-4.61					
10	1.90	1.64	28	6.36	-3.5	8.52	5880	-3.55					
10	2.30	2.00	41	6.92	-2.69	7.78	6860	-2.72					
10	2.91	2.52	65	6.66	-1.15	6.58	8900	-1.15					
-10	3.40	2.90	88	6.01	0.379	5.68	11150	0.422					
10	4.15	3.44	127	5.21	3.05	4.86	14830	3.14					
10	5.35	4.29	205	4.51	8.47	4.47	20462	8.49					
10	6.58	5.08	293	3.92	14.9	4.39	25800	14.5					
10	8.02	6.10	437	3.73	25.1	4.35	32880	24.2					
10	11.33	8.69	880	3.83	55.5	4.26	51700	54.9					
Железо													
		Экс		Теория (2)-(14)									
5	4.16	3.09	202	6.10	0.662	6.09	11640	0.628					
5	5.38	3.81	322	5.38	5.82	5.41	17400	5.70					
10	4.18	3.50	115	4.83	1.09	4.68	13530	1.13					
10	5.35	4.39	184	4.37	6.4	3.87	19940	6.67					
10	6.62	5.20	270	_3.66	13.5	3.59	25900	13.5					
10	8.12	6.23	397	3.38	23.7	3.50	33150	23.5					
20	1.15	1.03	4.6	3.58	-6.78	6.35	4860	-6.81					
20	1.90	1.73	13	4.44	-5.63	7.54	5740	-5.68					
20	2.36	2.19	20	5.37	-4.7	6.82	6700	-4.73					
20	2.93	2.73	31	5.60	7 3.2	5.91	8290	-3.22					
20	3.40	3.15	42	5.33	-1.68	5.00	9990	-1.66					
20	5.45	4.79	102	3.24	7.14	2.68	19920	7.47					
20	6.75	5.73	152	2.59	14.9	2.38	26290	,15.1					
20	8.44	6.89	228	2.13	27.0	2.25	35150	26.7					

4 ЖЭТФ, №4 (10)

1249

самосогласованного поля [20] и примерно равному 1.2-1.3.

3. Смена наклонов dD/dU на первом участке адиабат физически означает, что в процессе сжатия в образце полностью исчезают поры и его плотность наиболее близка (для данной пористости) к значению кристаллической плотности исследуемого металла. Дальнейшее увеличение давлений будет соответствовать малосжимаемым ветвям адиабат. В зависимости от пористости наклон кривых сжатия $dP/d\sigma$ будет меняться от положительного (для m < 2) и равного нулю (m = 2-3) до отрицательного (m > 3). Все типы этих адиабат получены экспериментально для железа, меди и никеля.

4. ТЕРМОДИНАМИКА НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ МЕТАЛЛОВ; Сравнение с экспериментом

Переходя к анализу полученных экспериментальных данных, следует подчеркнуть сложность их физической интерпретации. Особенностью динамических экспериментов [3,6] является то, что термодинамической зависимостью, непосредственно получаемой из опыта, является так называемое калорическое уравнение состояния: зависимость внутренней энергии от термодинамически сопряженных переменных — давления и удельного объема E(P, V). В то же время традиционная физическая интерпретация механизмов неидеальности в плазме существенно опирается на температуру и связанные с ней параметры неидеальности, электронного вырождения, степени ионизации и др., что требует знания зависимости T(P, V). Восстановление температуры по результатам измерения калорического уравнения состояния возможно на основе идеи Зельдовича [30]. Для плазмы цезия это было проделано в [31, 32]. При всей перспективности в настоящий момент такой подход не может быть в полной мере реализован для обсуждаемых в данной работе результатов ударного сжатия пористых металлов. Поэтому здесь целесообразно разделять две стадии: первая — анализ непосредственно наблюдаемых величин без привлечения вспомогательных модельных расчетов; вторая — все, что получается с привлечением таких плазменных моделей.

Давая общую характеристику результатов эксперимента, полезно, следуя [33], рассмотреть диаграмму внутренняя энергия E-плотность ρ , дополненную расчетом изотерм вещества с использованием какой-либо модели. На рис. 5 приведена Е-р-диаграмма для никеля [34]. Она демонстрирует тот факт, что вся фазовая диаграмма вещества (диаграммы других металлов подобны обсуждаемой) отчетливо распадается на две области качественно различного поведения термодинамических зависимостей. Большую часть занимает область относительно разреженной ($\rho \ll \rho_0$) «газовой» плазмы, характеризуемой двумя отличительными признаками — плавным убыванием энергии при изотермическом сжатии и отчетливым проявлением (на больших интервалах изменения плотности) так называемых оболочечных осцилляций всех термодинамических зависимостей (см. подробнее [35]). При $\rho > \rho_0$ такое поведение сменяется резким ростом энергии и обобщенного фактора сжимаемости $Z(n_{nucl}, n_e, T) = P/P^{ideal}$, что традиционно интерпретируется как «ионизация давлением». Этот процесс в пределе высокой плотности завершается выходом в область состояний, хорошо описываемых моделью системы подвижных ядер, погруженных в слабонеидеальный газ вырожденных электронов. Для описания термодинамики в этой области успешно применяется хорошо развитый аппарат ячеечных представлений [2, 36-38]. Между двумя указанными выше областями параметров располагается переходная область, характеризующаяся ми-



Рис. 5. Диаграмма плотность-энергия для плазмы никеля [34]. Изображены расчетные изотермы и экспериментальные точки, полученные в результате ударного сжатия сплошных и пористых образцов никеля [4, 28]. Отмечены линии постоянных параметра кулоновской неидеальности ($\Gamma_D = \sqrt{4\pi(e^2/k_BT)^3 \sum n_{\alpha}Z_{\alpha}^2}$) и параметра вырождения электронов $n_e \lambda_e^3$

нимальными значениями внутренней энергии и фактора сжимаемости и максимальным нарушением условий слабой неидеальности. Глубина и местоположение на изотермах минимумов, соответствующих термическому и калорическому уравнениям состояния, может условно рассматриваться как средоточие максимальной неопределенности нашего знания о термодинамических свойствах сжатого и нагретого вещества. Уникальность ударно-волнового сжатия пористых мишеней состоит в том, что оно дает информацию о поведении плотной сильнонеидеальной плазмы именно в этой, наиболее сложной и интересной области.

Основу химической модели (см., например, [1, 39-43]) составляет представление свободной энергии квазинейтральной смеси электронов, ионов, атомов и молекул в виде суммы идеально-газовых слагаемых $F_{i,e}^0$ для совокупности всех компонент и членов, ответственных за различные виды межчастичных взаимодействий, рассматриваемых в химической модели раздельно:

$$F \equiv \sum F_i^0 + F_e^0 + F_{ii,ie,ee,...}^*$$
(2)

Атомы и ионы подчиняются больцмановской статистике и их вклад имеет вид

$$F_i^0 = \sum_j N_j k_B T \left(\ln \frac{n_j \lambda_j^3}{Q_j} - 1 \right).$$
(3)

4*

Здесь k_B — константа Больцмана, Q_j — полная статсумма *j*-го сорта атомов или ионов, λ_j — тепловая волна де-Бройля *j*-го сорта частиц.

4.1. Электронное вырождение

Эффекты электронного вырождения важны в рассматриваемой области фазовой диаграммы, так как параметр вырождения для свободных электронов может достигать нескольких единиц:

$$n_e \lambda_e^3 \approx 1, \quad \lambda_e^2 \equiv 2\pi \hbar^2 / m_e k_B T.$$

В рамках квазихимического представления, где электроны разделены на два сорта свободные и связанные — эффект вырождения прежде всего сказывается уже в рамках идеально-газового слагаемого, качественно изменяя зависимость давления и химического потенциала от плотности. Основной эффект электронного вырождения в перестройке механизма неидеальности состоит в постепенном ослаблении участия электронов (по мере роста их вырождения) в механизме взаимного экранирования зарядов. Пределом этой тенденции при экстремальном сжатии вещества [2] является «выключение» электронов из этого механизма и переход экранирования в системе ионов в разряд, описываемый так называемой моделью ионной смеси — вариантом модели однокомпонентной плазмы. В рамках настоящей работы основным способом учета электронного вырождения являлся учет этого эффекта в рамках идеально-газового слагаемого свободной энергии:

$$F_e^0 = \frac{2Vk_BT}{\lambda_e^3\sqrt{\pi}} \left[\frac{\mu_e}{k_BT} I_{1/2} \left(\frac{\mu_e}{k_BT} \right) - \frac{2}{3} I_{3/2} \left(\frac{\mu_e}{k_BT} \right) \right],\tag{4}$$

$$\frac{P_e^0}{n_e k_B T} = \frac{2}{3} \frac{E_e^0}{N_e k T} = \frac{2}{3} \frac{I_{3/2}(\mu_e/k_B T)}{I_{1/2}(\mu_e/k_B T)}.$$
(5)

Здесь электронная плотность n_e и химический потенциал μ_e связаны соотношением

$$n_e \lambda_e^3 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_{1/2} \left(\frac{\mu_e}{k_B T} \right), \quad I_t(x) = \int_0^\infty \frac{y^t dy}{1 + \exp(y - t)}.$$
 (6)

В рамках химической модели плазмы вырождение электронов приводит прежде всего к эффективному сдвигу ионизационного равновесия в сторону меньших степеней ионизации, а кроме того, к прямой поправке в уравнении состояния, соответствующей дополнительному эффективному отталкиванию.

4.2. Эффекты неидеальности

Описание эффектов неидеальности в данной работе разбивалось на два этапа. В рамках одного из них, реализованного в виде кода «SAHA-3» и неоднократно применявшегося в приложениях [1, 34, 44–48], используется «минимальный» набор шагов, позволявший в ряде случаев добиться в пределах экспериментальной точности удовлетворительного согласия с данными эксперимента по динамическому (ударно-волновому)

сжатию различных веществ: инертных газов, цезия, высокопористых образцов металлов и т. д. Некоторая упрощенность этого подхода необходима для возможности эффективного включения процедуры расчета уравнения состояния в достаточно громоздкие газодинамические расчеты, предъявляющие высокие требования к выполнению всех вспомогательных вычислений.

В рамках этого сокращенного подхода использовались следующие приближения.

1. Учет электронного вырождения ограничивается идеально-газовым слагаемым.

2. Эффект кулоновской неидеальности учитывается в рамках так называемого дебаевского (кольцевого) приближения в большом каноническом ансамбле [44, 49].

3. При расчете внутренних статистических сумм возбуждения атомов и ионов учитывается только основное состояние.

4. Учитывается интенсивное короткодействующее отталкивание атомов и ионов в рамках приближения смеси твердых шариков с существенно различающимися размерами атомов и ионов различной кратности.

5. Атомы и ионы считаются «проницаемыми» для электронов, т.е. последние не включаются в сферу действия приближения твердых сфер и «не чувствуют» эффективного увеличения плотности из-за наличия у атомов и ионов собственного объема.

6. Учитывается дополнительное короткодействующее притяжение атомов и ионов, обеспечивающее эффективное описание наличия энергии связи конденсированного вещества.

Одним из преимуществ обсуждаемого сокращенного описания с точки зрения количественных расчетов является принципиальное отсутствие в используемой форме учета кулоновской неидеальности и статсумм возбуждения, возможности спонтанной потери системой термодинамической устойчивости (матрица || $\partial \mu_i / \partial n_i$ || положительно определена при любой степени сжатия плазмы [1, 44]). Специально проведенные расчеты с использованием для раздельного описания ионной неидеальности в так называемой модели ионной смеси [50], а электронной — как взаимодействующего электронного газа [51] («сдвоенная модель однокомпонентной плазмы» по терминологии [52] — данное приближение было использовано в работе [53] для описания термодинамики неидеальной плазмы смеси водорода и гелия) показали, что диапазон параметров, достигаемых при ударном сжатии пористых образцов большинства металлов, попадает в область существования даваемой этим приближением аномалии типа фазового перехода («вандер-ваальсовых петель»), форма и положение которых существенно зависят от максимальной степени ионизации, допускаемой принятой расчетной процедурой. Подобная чувствительность уравнения состояния к выбору приближения, используемого для описания кулоновской неидеальности, характерна именно в этом диапазоне параметров для подавляющего большинства предлагавшихся в литературе моделей кулоновской неидеальности.

4.3. Кулоновское взаимодействие

Кулоновское взаимодействие учитывалось в рамках дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле [49] (для многократной ионизации см. [44]):

$$\frac{\Omega}{Vk_BT} \equiv \frac{F - \sum N_j \mu_j}{Vk_BT} \equiv \frac{P}{k_BT} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} - \frac{\tilde{\kappa}_D^3}{24\pi} = \sum_{\alpha} \left[n_{\alpha} - \frac{\tilde{\Gamma}}{6} \frac{n_{\alpha} z_{\alpha}^2}{1 + z_{\alpha}^2 \tilde{\Gamma}_D / 2} \right].$$
(7)

Здесь выраженный через активности модифицированный кулоновский параметр неидеальности $\tilde{\Gamma}_D$ определяется из уравнения

$$\tilde{\Gamma}_D^2 = \left(\frac{e^2}{k_B T \tilde{r}_D}\right)^2 = 4\pi \left(\frac{e^2}{k_B T}\right)^3 \sum_{\alpha} \frac{z_{\alpha}^2 n_{\alpha}}{1 + z_{\alpha}^2 \tilde{\Gamma}_D / 2},\tag{8}$$

где $\tilde{r}_D = 1/\kappa_D$ — модифицированный дебаевский радиус экранирования. Заметим, что параметр неидеальности отличается от обычного дебаевского параметра неидеальности Γ_D , для которого

$$\Gamma_D^2 \equiv 4\pi (e^2/k_BT)^3 \sum n_{\alpha} z_{\alpha}^2.$$

Это приближение эквивалентно классическому приближению Дебая–Хюккеля в пределе $\Gamma_D \rightarrow 0$ и отличается от него заметно меньшими значениями соответствующих поправок в области умеренной и сильной неидеальности ($\Gamma_D \geq 1$).

4.4. Короткодействующее отгалкивание ионов и атомов

Эффект перекрытия электронных оболочек атомов и ионов при высоких степенях сжатия ведет к появлению интенсивного отталкивания тяжелых частиц на коротких расстояниях. Этот эффект учитывается в рамках модели смеси твердых сфер различных радиусов. В непосредственных вычислениях использовалась так называемая «формула Мансури» [54]):

$$\frac{\Delta F_{HSM}}{\sum N_i k_B T} \equiv f_{HSM}(\nu) = X \frac{\nu}{(1-\nu)^2} + 3Y \frac{\nu}{1-\nu} + (X+1)\ln(1-\nu), \tag{9}$$

$$\nu \equiv \frac{4\pi}{3} n \overline{r^3}, \quad \overline{r^k} \equiv \sum_i n_i r_i^k / \sum n_i, \quad k = 1, 2, 3,$$

$$X = \left(\overline{r^2}\right)^3 \left(\overline{r^3}\right)^{-2}, \quad Y = \overline{r^2} \overline{r^1} \left(\overline{r^3}\right)^{-1}.$$
(10)

Вклады в давление, энергию и химический потенциал следуют из (9), (10):

$$\frac{\Delta P_{HSM}}{\sum_{i} n_{i} k_{B} T} = \frac{\partial f_{HSM}(\nu)}{\partial \nu}, \quad \frac{\Delta \mu_{i}}{k_{B} T} = f_{HSM}(\nu) + \sum_{j} n_{j} \frac{\partial f_{HSM}(\nu)}{\partial n_{i}}, \quad \Delta E_{HSM} \equiv 0.$$
(11)

Для определения радиусов частиц, r_j , применялись две процедуры. В первой использовалось так называемое приближение ограниченного атома [1,41], в рамках которого атом (или ион) помещается в сферическую ячейку с жесткими стенками и с помощью метода Хартри-Фока [55] рассчитывается электронная структура частицы при переменном радиусе атомной ячейки [56, 57]. Результаты такого расчета показаны на рис. 6, где представлены сдвиги энергии основного состояния атома и ионов меди в зависимости от радиуса ячейки.

Дальнейшее определение «эффективного» радиуса ячейки базируется на соотношении

$$\Delta E(r_i) = \text{const} \cdot I_i$$



Рис. 6. Сдвиг энергии основных состояний атома меди и его ионов. Расчет методом Хартри-Фока [56, 57]

где $\Delta E(r_i)$ — сдвиг энергии основного состояния, I_i — соответствующий потенциал ионизации, r_i — радиус атомной ячейки.

Более простая процедура [58, 59, 48] использует предположение о близости структуры атома к водородоподобной. В этом случае каждому иону ставится в соответствие характерный размер, связанный с потенциалом ионизации соотношением

$$r_i \approx r_0 \left[(Z_i + 1) I_0 \right] / I_i, \tag{12}$$

где r_0 , I_0 — радиус и ионизационный потенциал атома, а r_i , I_i — то же для *i*-го иона, Z_i — заряд иона.

В реальных расчетах обе процедуры использовались только для определения отношения радиусов атома и остальных ионов. Опорная же величина атомного радиуса определялась в соответствии с так называемым правилом Ашкрофта–Леккнера [60], согласно которому соответствующий нормальной плотности оптимальный размер твердых шаров определяется из условия фиксированного значения параметра упаковки:

$$\nu \equiv 4\pi \sum n_i r_i^3 / 3 \simeq 0.45.$$
 (13)

Согласно [60] такой выбор приводит к наилучшему совпадению положения первого максимума парной корреляционной функции системы твердых шаров с экспериментально наблюдаемой величиной для целого ряда простых металлов.

4.5. Дополнительное притяжение

Вычисления в рамках приближения (2)–(13), проводившиеся ранее [58, 59, 48, 34] приводят к вполне приемлемому согласию с экспериментальными ударными адиабата-

ми металлов при относительно больших скоростях ударных волн, и соответственно, при высоких давлениях и температурах. Учет короткодействующего отталкивания принципиален для достижения этого согласия. Однако проведенные расчеты выявили существование области относительно низких давлений [58, 59], соответствующих низким скоростям ударных волн, в которой приближение (2)–(13) в принципе не позволяет получить решение уравнения Рэнкина–Гюгонио (1) для ударной адиабаты ни при каком наборе радиусов $\{r_i\}$. Это связано с тем, что приближение (2)–(13) не содержит механизма, учитывающего энергию связи, ответственную за существование конденсированного состояния вещества. Для улучшения экстраполяционных свойств при описании нижних участков ударных адиабат приближение (2)–(13) было дополнено членами, эффективно учитывающими наличие вышеупомянутой энергии связи, в виде

$$\Delta F = \Delta E = -A \left(\sum N_i \right)^{1+\delta} V^{-\delta}, \quad \Delta P = \delta(\Delta E/V),$$

$$\Delta \mu_i = -(1+\delta)V^{-\delta} \left(\sum N_i \right)^{\delta}, \quad A, \delta = \text{const.}$$
(14)

Поправки (14) не зависят от температуры. Выбор $\delta = 1$ соответствует традиционной форме приближения ван-дер-Ваальса. Выбор $\delta = 1/3$ считается более соответствующим «металлическому» (плазменному) типу связи конденсированного вещества. В этом случае суммирование ведется по всем тяжелым частицам, так что поправки (14) не сдвигают ионизационного равновесия. Согласно утверждению работ [61] именно такой показатель степени соответствует виду эффективного притяжения в «расширенных» металлах, т.е. металлах при промежуточных плотностях, соответствующих плотности в критической точке перехода газ — жидкость.

4.6. Сравнение экспериментальных и расчетных данных

Результаты расчетов ударных адиабат для пористых никеля, меди и железа с использованием описанной выше модели уравнения состояния (2)–(14) представлены на рис. 7–10. На рис. 7 приведены ударные адиабаты пористого никеля, рассчитывавшиеся ранее в работах [58, 59, 48, 34] и сопоставлявшиеся там с имевшимися ранее экспериментальными данными (см. [4]). Это сравнение пополнено в данной работе результатами дополнительных измерений для пористости m = 15 и 20. Обращает на себя внимание тот факт, что новые данные хорошо совпадают с результатами предыдущих расчетов. На рис. 7 также приведены результаты сравнения для адиабат образцов с низкой пористостью (включая сплошную адиабату). Цель этого общего сравнения — показать, что химическая модель плазмы даже в предложенном выше сокращенном варианте вполне удовлетворительно описывает в целом весь набор экспериментально измеренных ударных адиабат никеля.

На рис. 8 представлены результаты методических расчетов, иллюстрирующие влияние на конечные результаты отдельных составляющих принятой методики термодинамического расчета в рамках модели (2)–(14). Подчеркнем тот факт, что поведение расчетных ударных адиабат в области относительно низких давлений принципиально требует одновременного учета в химической модели интенсивного отталкивания и эффективного притяжения тяжелых частиц.

Сравнение расчетных и новых экспериментальных данных для плазмы железа приведено на рис. 9. Заметим, что использованные в расчетной модели параметры отталкивания (сочетание собственных размеров частиц) и притяжения выбирались по той



Рис. 7. Ударные адиабаты пористого никеля. Данные расчета: 1 — расчет согласно (2)-(14), суммирование в (14) по всем тяжелым частицам; экспериментальные данные: 2 — [62]; 3 — [63]; 4 — [64]; 5 — [29]; 6 — [27] (m = 2); 7 — [27] (m = 2.32); 8 — [27] (m = 5.62); 9 — [65]; 10 — [28]; 11 — настоящая работа

же схеме, что и ранее. В табл. 2 приведены значения радиусов атомов и ионов для меди, никеля и железа, использованные в расчетах данной работы. Как и для никеля, для железа можно констатировать, что вполне удовлетворительное соответствие результатов теории и эксперимента при высоких пористостях (и максимально достигнутых степенях расширения первоначально конденсированного металла) постепенно ухудшается по мере продвижения в область все более и более плотной плазмы, что достигается в опытах со сжатием низкопористых образцов.

Таблица 2

Z_i	0	1	2	3	4	5	6	7
Cu	2.00	1.700	1.55	1.40	1.25	1.10	0.95	0.8
Ni	2.00	1.684	1.27	1.10	1.00	0.84	0.80	
Fe	2.27	2.00	1.58	1.18	1.075	0.978	0.904	-

Сравнение расчетных и экспериментальных данных для плазмы меди представлено на рис. 10. Полученные ранее результаты [34, 58, 59, 48] дополнены новыми экспериментальными данными. Можно констатировать в целом удовлетворительное соответствие теории и эксперимента. Вместе с тем обращает на себя внимание расхождение расчетных и экспериментальных ударных для случая адиабаты с m = 10 в верхней части экспериментально достигнутого диапазона давлений. Анализируя причину этого расхождения, следует принять во внимание очевидную упрощенность теоретической модели, описывающей взаимодействие в системе, и крайнюю чувствительность получаемых с ее помощью результатов к конкретному выбору сочетания собственных размеров частиц.



Рис. 8. Ударные адиабаты пористого никеля для m = 10. Сравнение различных вариантов модели: 1 — эксперимент; 2 — идеальная плазма, атомы в основном состоянии; 3 — то же, что 2, + кулоновское взаимодействие (3)-(6); 4 — то же, что 3, + статсуммы по Планку-Ларкину; 5, 6, 7 — то же, что 2, 3, 4, + твердые сферы (7)-(9); 8 — (2)-(14), $\delta = 1$, суммирование в (14) только по атомам; 9 — то же, что 8, но + радиусы частиц увеличены на 20%

Сказанное подтверждается результатами дополнительных расчетов, проведенных с несколько измененным (увеличенным) набором радиусов, также приведенным на рис. 10. Они показывают, что полученное ранее различие экспериментальных и расчетных данных лежит в пределах естественной неопределенности химической модели в рассматриваемой области параметров плазмы. Вместе с тем, если принять во внимание уже отмеченную ранее [46, 48] и более подробно проанализированную в [66] особенность поведения ударных данных на пористых адиабатах меди с m = 3 и m = 4, требующую для своего описания модельного уравнения состояния с эффективно более высокой «жесткостью», нежели той, что дается выбранным в [58, 59, 48, 34] набором собственных размеров, можно заключить, что модельное описание термодинамики ударно-сжатой плазмы менее универсально и требует большей степени учета индивидуальных особенностей



Рис. 9. Ударные адиабаты пористого железа: 1 — расчет согласно (1)-(14), суммирование в (14) по всем тяжелым частицам; 2 — экспериментальные данные [27] (m = 2.9); 3 — экспериментальные данные [27]; 4 — настоящая работа



Рис. 10. Ударные адиабаты пористой меди: 1 — расчет согласно (1)-(14), суммирование в (14) по всем тяжелым частицам; 2 — экспериментальные данные [27]; 3 — экспериментальные данные [27]; 4 — экспериментальные данные, настоящая работа

каждого конкретного металла, чем это предполагается при построении упрощенной методики, описанной выше.

4.7. Сравнение с результатами псевдопотенциальной модели

Наряду с приближением (2)–(14) в сравнительных расчетах термодинамических свойств плазмы, создаваемой ударным сжатием пористых образцов металлов, дополнительно использовалась модель учета эффектов неидеальности, представляющая собой развитие одного из вариантов (см. подробнее [52]) псевдопотенциального подхода. Его основу составляет описание эффектов кулоновской неидеальности при помощи эффективных потенциалов взаимодействия свободных зарядов. Этот подход успешно развивался в работах [67, 40 и др.]. Основные положения одного из вариантов этого подхода, использовавшегося в настоящей работе, заключаются в следующем.

1. Глубина электрон-ионного псевдопотенциала связана с положением условной границы ε , вообще говоря, переменной и разделяющей свободные и связанные состояния каждой пары электрон — ион. Эта же величина одновременно является границей связанных состояний, учитываемых при вычислении статсуммы возбуждения атомов и ионов. Для ион-ионного и электрон-электронного взаимодействий сохранялась кулоновская форма потенциала:

$$\Phi_{ie}^*(r) = -\frac{Z_i e^2}{r} \left(1 - e^{-r/\sigma_{ie}}\right), \quad \sigma_{ie} \equiv \sigma_{ie}(n, T), \quad \Phi_{\alpha\alpha}^*(r) = \frac{Z_\alpha Z_\alpha e^2}{r}, \quad \alpha = i, e.$$
(15)

2. Приближение строится на уровне парных корреляционных функций $F_{ab}(r)$, для которых, согласно [68, 69], на далеких расстояниях сохраняется функциональная форма, соответствующая высокотемпературному пределу слабой неидеальности для системы с потенциалом взаимодействия (15) [70]:

$$F_{ei}(r) = 1 + \Psi_{ei} \frac{e^{-p_i r} - e^{-\kappa r}}{r}.$$
 (16)

3. На близких расстояниях ион-ионные и электрон-электронная корреляционные функции модифицированы с целью исправления известного недостатка, присущего линеаризованным («кольцевым») приближениям [70] (типа приближения Дебая-Хюккеля), так называемых отрицательных вероятностей (*i*, *j* соответствуют различным ионам):

$$F_{ij} = 1 - B_{ij} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad r \ge R_{ij},$$

$$F_{ij} \simeq 0, \quad r \le R_{ij}.$$
(17)

4. Зависимость параметров корреляционных функций (16), (17) от потенциалов межчастичного взаимодействия определяется с привлечением условия «локальной электронейтральности» (18) [71], не связанного с ограничением слабой неидеальности. Наряду с этим также использовалось приближенное условие, связывающее амплитуду электрон-ионных корреляций («экранирующего облака») с глубиной псевдопотенциала Φ_{ei}^* (r = 0) (19):

$$\int \left\{ n_{ei} e \left[F_{ei}(r) - 1 \right] + \sum n_{ij} e Z_j \left[F_{ij}(r) - 1 \right] \right\} d\mathbf{r} = -Z_i, \tag{18}$$

$$F_{ei}(0) \equiv 1 + \Psi_{ei}(0) \approx \beta \Phi_{ei}^*(0), \quad F_{ii}(0) \approx 0.$$
 (19)

5. При вычислении параметра экранирования к учитывается постепенное «выключение» электронов из экранирования по мере роста степени их вырождения, так что в пределе полного вырождения механизм экранирования осуществляется только за счет ион-ионных корреляций:

$$\kappa^{2} = 4\pi e^{2} \left(\frac{\partial \mu_{e}^{0}}{\partial n_{e}} + \sum_{i} \frac{\partial \mu_{i}^{0}}{\partial n_{i}} \right).$$
⁽²⁰⁾

6. В поправках к термодинамическим величинам участвует следующий из теоремы вириала сдвиг средней кинетической энергии свободных зарядов ΔE_{kin}:

$$\Delta PV = (1/3) \left(2\Delta E - \Delta E_{pot} \right) = (1/3) \left(2\Delta E_{kin} + \Delta E_{pot} \right), \tag{21}$$

$$\Delta E = V \int \left\{ \sum_{i} n_i n_e F_{ei}(r) \Phi_{ei}^*(r) + \sum_{i,j} n_i n_j F_{ij}(r) \Phi_{ij}^*(r) \right\} d\mathbf{r},$$
(22)

$$\Delta E_{pot} = -V \int \left\{ \sum_{i} n_i n_e F_{ei}(r) \frac{Z_i e^2}{r} - \sum_{i,j} n_i n_j F_{ij}(r) \frac{Z_i Z_j e^2}{r} \right\} d\mathbf{r}, \qquad (23)$$

$$\Delta \mu_i = \int \left\{ n_e F_{ei}(r) \Phi_{ei}^*(r) + \sum_j n_j F_{ij}(r) \Phi_{ij}^*(r) \right\} d\mathbf{r}$$
(24)

(здесь ΔE_{pot} и ΔE — поправки к потенциальной и полной внутренней энергии, μ_i и μ_e — химические потенциалы свободных зарядов). Отметим, что в области $\Gamma_D \sim 1$ в приближении (15)–(24) не сохраняется традиционное соотношение между поправками к давлению и внутренней энергии свободных зарядов ($\Delta E = 3\Delta PV$). По сравнению со многими предложенными в литературе кулоновскими приближениями это приводит к эффекту, качественно равносильному дополнительному электрон-ионному отталкиванию [72], зависящему от параметра неидеальности Γ_D .

Результаты расчета параметров ударного сжатия никеля и меди с использованием модели (15)–(24) приведены в табл. 1 в сравнении с результатами непосредственных измерений. При проведении конкретных расчетов использовалась комбинированная процедура выбора упомянутой выше границы ε , разделяющей свободные и связанные состояния пары электрон-ион. Эта граница соответствовала ограничению энергии связи возбужденных состояний атома величиной $-k_BT$ при высоких температурах и величиной энергии взаимодействия зарядов на среднем расстоянии между тяжелыми частицами при умеренных температурах и высоких сжатиях. Эта же величина ε , как указывалось выше, ограничивала связанные состояния, учитываемые при расчете статсумм возбуждения атомов и ионов. Проблема корректного учета связанных состояний в условиях частично ионизованной сильнонеидеальной плазмы имеет длинную историю и в настоящее время является открытой. Результаты ряда проведенных ранее экспериментов [32, 73–75, 45] приводили к выводу (см. подробнее обсуждение в [1, гл. 4]) о неожиданно низком вкладе возбужденных состояний в калорическое уравнение состояния неидеальной плазмы в сравнении с рекомендациями многих существовавших к тому времени моделей. Имеются работы, теоретически обосновывающие закономерность такого понижения вклада возбужденных состояний [76]. Сравнение экспериментальных данных настоящей работы с двумя использованными моделями расчета не позволяет в настоящее время сделать определенных выводов по этому вопросу, так как затруднительно при реальной точности эксперимента выделить и проверить отдельно влияние вклада возбужденных состояний атомов и ионов на общее уравнение состояния исследуемой плазмы.

Другой проблемой, традиционно находящейся в центре внимания теории неидеальной плазмы, является вопрос о существовании самостоятельного так называемого «плазменного» фазового перехода, отдельного от известного перехода газ — жидкость в металлах ([18, 40] и др). Результаты настоящих экспериментов не зафиксировали каких-либо газодинамических аномалий, ассоциируемых с наличием в системе неизвестного фазового перехода [6, 3, 39]. Следует подчеркнуть, что оба приближения, (2)–(14) и (15)–(24), использованные в расчетах настоящей работы, также не содержат таких аномалий.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использование в экспериментах изготовленных по оригинальной технологии пористых образцов меди, никеля и железа, плотность которых в 10–20 раз меньше нормальной плотности металлов, а также разработанные новые генераторы мощных ударных волн со сферической геометрией позволили проникнуть в практически неисследованную область высоких температур $T > 10^4$ K, плотностей $\rho = (0.1-1)\rho_0$ при давлениях в несколько десятков гигапаскалей.

В дальнейшем представляет интерес исследовать сжимаемость сверхпористых металлов при еще меньших начальных плотностях (0.1–0.05 г/см³). Такие состояния можно получить с использованием паров металлов. Задача это является технически трудной, но принципиально выполнимой.

Химическая модель плазмы является достаточно гибкой, чтобы дать удовлетворительное термодинамическое описание плазмы металлов в нетрадиционной для этой модели области плотностей конденсированного вещества и мегабарных давлений, когда мы имеем дело одновременно с несколькими механизмами сильной коррелированности частиц как вследствие вырождения, так и вследствие сильной неидеальности по многочисленным эффективным взаимодействиям.

Полученные результаты показывают, что уравнение состояния может быть удовлетворительно описано в химической модели плазмы даже в приближении, которое при этом не воспроизводит должным образом структуру и характер электронной локализации.

Работа была выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 95-02-03886, 97-02-17339, 97-02-17340 и 96-02-18832).

Литература

- В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Н. И. Кузнецова, В. И. Кучеренко, Г. Б. Лаппо, Б. Н. Ломакин, Г. А. Павлов, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, в сб. Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора, ред. В. М. Иевлева, Атомиздат, Москва (1980).
- 2. Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик, Г. В. Шпатаковская, УФН 117, 3 (1975).
- 3. В. Е. Фортов, И. Т. Якубов, Физика неидеальной плазмы, Черноголовка (1984).
- Свойства конденсированных веществ при высоких температурах и давлениях, под ред. Р. Ф. Трунина, ВНИИЭФ (1992).
 - 5. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, УФН 167, 1215 (1997).
 - 6. В. Е. Фортов, УФН 138, 361 (1982).
 - 7. Compendium of Shock Wave Data, ed. by Van Thiel, Livermore Lawrence Laboratory Report, UCRL-50108, Vol. 1-3 (1977).
 - LASL Shock Hugoniot Data, ed. by S. P. Marsh, Univasrsity California Press, Berkley-LA-London (1980).
 - М. В. Жерноклетов, В. Н. Зубарев, Р. Ф. Трунин, В. Е. Фортов, Экспериментальные данные по ударной сжимаемости и адиабатическому расширению конденсированных веществ при высоких плотностях энергии, Черноголовка (1996).
- 10. Л. В. Альтшулер, УФН 15, 197 (1965).
- 11. Л. В. Альтшулер, А. В. Бушман, М. В. Жерноклетов и др., ЖЭТФ 78, 741 (1980).
- 12. Л. В. Альтшулер, Р. Ф. Трунин, К. К. Крупников, Н. В. Панов, УФН 166, 575 (1996).
- 13. A. H. Jones, W. H. Isbell, and C. J. Maiden, J. Appl. Phys. 37, 3493 (1966).
- 14. С. И. Анисимов, А. М. Прохоров, В. Е. Фортов, УФН 134, 1000 (1983).
- V. Fortov, M. Lebedev, K. Dyabilin, O. Vorobiev, V. Smirnov, and E. Grabovskij, in: *Shock Compression of Condensed Matter-1995*, ed. by S. C. Schmidt and W. C. Tao, AIP Conf. Proc. 370, 1255 (1996).
- K. Baumung, J. H. Bluhm, B. Goel, P. Hoppe, H. U. Karow, D. Rusch, V. E. Fortov, G. I. Kanel, S. V. Razorenov, A. V. Utkin, and O. Yu. Vorobjev, Laser and Particle Beams, 14, 181 (1996).
- 17. Ах В. Бушман, И. В. Ломоносов, В. Е. Фортов, Уравнение состояния металлов при высоких плотностях энергии, Черноголовка (1992).
- 18. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, Теплофизика высоких темп. 8, 413 (1970).
- 19. В. Е. Фортов, И. Т. Якубов, Неидеальная плазма, Энергоатомиздат, Москва (1994).
- 20. Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина, Препринт № 35 ИПМ АН СССР, Москва (1975).
- 21. Л. Д. Ландау, Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ 14, 32 (1944).
- 22. Л. В. Альтшулер, М. Н. Павловский, Л. В. Кулешова, Г. В. Симаков, ФТТ 5, 279 (1965).
- 23. Л. В. Альтшулер, С. Б. Кормер, А. А. Баканова, Р. Ф. Трунин, ЖЭТФ 38, 790 (1960).
- 24. Л. В. Альтшулер, Р. Ф. Трунин, К. К. Крупников, Н. В. Павлов, УФН 15, 197 (1965).
- 25. Л. В. Альтшулер, К. К. Крупников, Б. Н. Леденев и др., ЖЭТФ 54, 874 (1968).
- 26. А. В. Бугаева, А. А. Евстигнеев, Р. Ф. Трунин, Теплофизика высоких темп. 34, 684 (1996).
- Р. Ф. Трунин, Г. В. Симаков, Ю. Н. Сутулов, А. В. Медведев, Б. Д. Рогозкин, Ю. Е. Федоров, ЖЭТФ 96, 1024 (1989).
- 28. Р. Ф. Трунин, Г. Ф. Симаков, ЖЭТФ 103, 2180 (1993).
- 29. С. Б. Кормер, А. И. Фунтиков, В. Д. Урлин, А. Н. Колесникова, ЖЭТФ 42, 686 (1962).
- 30. Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ 32, 1577 (1957).
- 31. Б. Н. Ломакин, В. Е. Фортов, ЖЭТФ 63, 92 (1972).
- 32. А. В. Бушман, Б. Н. Ломакин, В. А. Сеченов, В. Е. Фортов, О. Е. Щекотов, И. И. Шарипджанов, ЖЭТФ 69, 1524 (1975).
- 33. Л. В. Альтшулер, С. Е. Брусникин, А. С. Марченко, Теплофизика высоких темп. 27, 636 (1989).

- 34. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevski, and V. E. Fortov, in: *Physics of Strongly Coupled Plasmas*, ed. by W. D. Kraeft and M. Schlanges, World Scientific, Singapore, (1996), p. 351.
- 35. И. Л. Иосилевский, В. К. Грязнов, Теплофизика высоких темп. 19, 1121 (1981).
- Г. В. Синько, Числ. методы мех. спл. среды 10, 124 (1978); Теплофизика высоких темп. 21, 1041 (1983).
- 37. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров, в сб.; Вопросы атомной науки и техники. Методы и программы численного решения задач математической физики, № 4, 16 (1979).
- Г. В. Шпатаковская, Препринт № 54 ИПМ АН СССР, Москва (1975); Теплофизика высоких темп. 27, 677 (1989).
- 39. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, Наука, Москва (1968).
- В. Эбелинг, В. Крефт, Д. Кремп, Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле, Мир, Москва (1979).
- W. Ebeling, A. Förster, V. Fortov, V. Gryaznov, and A. Polishchuk, *Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas*, Teubner, Stuttgart-Leipzig (1991).
- 42. Н. Н. Калиткин, И. В. Ритус, А. М. Миронов, Препринт № 46 ИПМ АН СССР, Москва (1983).
- 43. Б. Н. Базылев, Ф. Н. Боровик, Г. С. Романов, Г. А. Вергунова, Квант. электр. 13, 1981 (1986).
- 44. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, Ж. прикл. мех. тех. физ., № 3, 70 (1973).
- В. К. Грязнов, М. В. Жерноклетов, И. Л. Иосилевский, В. Н. Зубарев, В. Е. Фортов, ЖЭТФ 78, 573 (1980).
- 46. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, Письма в ЖТФ 22(8), 1376 (1982).
- 47. В. К. Грязнов, В. Е. Фортов, Теплофизика высоких темп. 25, 1208 (1987).
- В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в сб.: Уравнения состояния, под ред. В. Е. Фортов, Москва (1995), с. 38.
- 49. А. А. Ликальтер, ЖЭТФ 56, 240 (1969).
- 50. M. Baus and J. P. Hansen, Phys. Rep. 59, 1 (1980).
- 51. S. Ichimaru, H. Iyetomi, and S. Tanaka, Phys. Rep. 149, 91 (1987).
- 52. И. Л. Иосилевский, Теплофизика высоких темп. 19, 1121 (1981).
- 53. T. Kahlbaum and A. Förster, Fluid Phase Equilibria 76, 71 (1992).
- 54. C. F. Mansoori, V. Carnahan, K. E. Starling, and T. W. Leland, J. Chem. Phys. 54, 1523 (1971).
- 55. Д. Хартри, Расчеты атомных структур, ИИЛ, Москва (1960).
- 56. В. К. Грязнов, Дисс. канд. физ.-мат. наук, Институт химической физики АН СССР, Черноголовка (1981).
- 57. А. Н. Иванова, В. К. Грязнов, Расчет атомов по методу Хартри-Фока, Отчет Института химической физики АН СССР, Черноголовка (1975).
- 58. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в сб.: Физика и техника плазмы, Минск, Изд-во БГУ (1994), с. 1.
- 59. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в сб.: Физика низкотемпературной плазмы, Петрозаводск (1995), с. 105.
- 60. N. W. Ashcroft and J. Lekner, Phys. Rev. 145, 83 (1966).
- 61. А. А. Ликальтер, ДАН СССР 259, 96 (1981); УФН 162, 119 (1992).
- 62. R. G. McQueen and S. P. Marsh, J. Appl. Phys. 31, 1253 (1960).
- 63. J. M. Walsh, M. H. Rice, R. G. McQueen, and F. L. Yarger, Phys. Rev. 108, 169 (1957).
- 64. Л. В. Альтшулер, А. А. Баканова, Р. Ф. Трунин, ЖЭТФ 42, 91 (1962).
- 65. Ю. Л. Алексеев, Б. П. Ратников, А. П. Рыбаков, Ж. прикл. мех. тех. физ. № 2, 101 (1971).
- 66. Ударные волны и экстремальные состояния вещества, под ред. Р. Ф. Трунина, В. Е. Фортова (1998) (в печати).
- 67. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, Теплофизика высоких темп. 11, 922 (1973); 12, 267 (1974); 13, 712, 913 (1975).
- 68. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, Числ. методы мех. спл. среды 4, 166 (1973).
- 69. И. Л. Иосилевский, Теплофизика высок. темп. 18, 447 (1980).

- 70. А. Е. Глауберман, И. Р. Юхновский, ЖЭТФ 22, 562 (1952).
- 71. F. Stillinger and R. Lowett, J. Chem. Phys. 49, 1991 (1968).
- 72. T. P. Wright and O. Theimer, Phys. Fluids 13, 895 (1970).
- 73. Б. Н. Ломакин, В. Е. Фортов, ЖЭТФ 63, 92 (1972).

ġ

- 74. И. Я. Дихтер, В. Я. Зейгарник, Теплофизика высоких темп. 15, 471 (1977).
- 75. В. Е. Фортов, А. А. Леонтьев, А. Н. Дремин, В. К. Грязнов, ЖЭТФ 71, 225 (1976).
- 76. А. С. Каклюгин, Г. Э. Норман, Теплофизика высоких темп. 25, 209 (1987).