

ОПИСАНИЕ СВОЙСТВ УДАРНО-СЖАТОГО ПЛАВЛЕНОГО КВАРЦА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА

А. Б. Медведев

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Разработанное ранее широкодиапазонное УРС диоксида кремния, основанное на модифицированной модели Ван-дер-Ваальса, использовано для расчета ударной адиабаты, скорости звука вдоль нее и других характеристик плавленого кварца. Результаты сопоставлены с новыми экспериментальными данными по ударному сжатию плавленого кварца до давления 1,6 ТПа и скорости звука до 1,1 ТПа. Также выполнено сравнение расчетных зависимостей (ударных адиабат, изотерм, изэнтроп), определенных на основе этого и двух других модельных уравнений состояния, до 1000 ТПа.

Ключевые слова: плавленый кварц, уравнение состояния, плотность, давление, температура, внутренняя энергия, волновая и массовая скорость, скорость звука, ударное сжатие, изэнтропическая разгрузка.

Широкодиапазонное уравнение состояния (УРС) диоксида кремния SiO_2 требуется при решении различных научно-технических задач. К таким уравнениям относятся некоторые версии УРС SESAME [1], УРС [2] и др. Они являются полуэмпирическими, т. е. содержат свободные параметры, которые подбираются на основе описания данных различных опытов. С появлением новых данных возможна их коррекция.

В [3] построено широкодиапазонное полуэмпирическое УРС SiO_2 на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса (модель мВдВ; “м” – модификация). Модель отражает испарение, диссоциацию и ионизацию вещества. Результаты модельных расчетов в [3] сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными по ударному сжатию исходно (перед фронтом ударной волны) сплошного α -кварца (и кварцита) с начальной плотностью $\rho_0 = 2,65 \text{ г/см}^3$, исходно пористых образцов кварца с пониженной начальной плотностью $\rho_0 < 2,65 \text{ г/см}^3$, данными по изэнтропической разгрузке, испарению и др. Показано их удовлетворительное описание. Модельное УРС [3] также, в целом, воспроизводит экспериментальные данные по ударному сжатию плавленого (аморфного)

кварца, обладающего $\rho_0 = 2,204 \text{ г/см}^3$, до давления $P \approx 0,6 \text{ ТПа}$ (1 ТПа = 1000 ГПа = 10 Мбар).

Относительно недавно были опубликованы результаты опытов по ударному сжатию плавленого кварца до $P \approx 1,6 \text{ ТПа}$ [4] и скорости звука C до $P \approx 1,1 \text{ ТПа}$ [5], которые дают важную информацию о свойствах жидкого вещества при $P \sim 1 \text{ ТПа}$ и повышенных (более высоких по сравнению с реализуемыми вдоль ударной адиабаты кварца $\rho_0 = 2,65 \text{ г/см}^3$) значениях температуры T . В [4, 5] данные опытов сопоставлены с результатами расчетов на основе некоторых версий УРС SESAME.

В настоящей работе подобные сравнения проведены для УРС [3]. Расчетная ударная $P(\rho)$ -зависимость находилась в результате решения уравнения

$$E = E_0 + P(1/\rho_0 - 1/\rho)/2. \quad (1)$$

Здесь E , P , ρ – характеристики УРС (E – внутренняя энергия, ρ – плотность). Отличим значений начальной энергии E_0 для кварца при $\rho_0 = 2,2 \text{ г/см}^3$ и $\rho_0 = 2,65 \text{ г/см}^3$ пренебрегалось. В состояниях, реализуемых при ударном сжатии, скорость звука определялась соотношением $C = \sqrt{(\partial P / \partial \rho)_S}$ (S – энтропия). На рис. 1 представлены $P(\rho)$ -зависи-

мости УРС SESAME 7386 (эта зависимость заимствована из [5]) и УРС [3]. На рис. 2 даны $C(P)$ -зависимости вдоль ударной адиабаты согласно трем версиям УРС SESAME (расчетные данные взяты из [5]) и УРС мВдВ. Среди уравнений SESAME измерения скорости звука наиболее адекватно воспроизводит уравнение 7386. Оно, однако, как видно из рис. 1, при $P \approx 0,2 - 1,6$ ТПа завышает ρ ударно-сжатого вещества на $\approx 4-5\%$. Расчетные зависимости УРС [3] в целом удовлетворительно описывают как поведение скорости звука, так и ударной сжимаемости. При этом в диапазоне $P \approx 0,2 - 0,6$ ТПа согласно этому УРС расчетная плотность больше плотности из [4, 9] на $\approx 2 - 3\%$, а при $P \approx 1,45 - 1,55$ ТПа она меньше по сравнению с приведенной в [4] на $\approx 3\%$. $P(\rho)$ -зависимость УРС [3] (а также рассматриваемого далее УРС [2]) не согласуется с результатом единичного опыта [10] (ромб с координатами $\rho = 8,47$ г/см³, $P = 1,66$ ТПа на рис. 1; результат зависит, в том числе, от используемого при его получении УРС Pb при давлении в несколько ТПа).

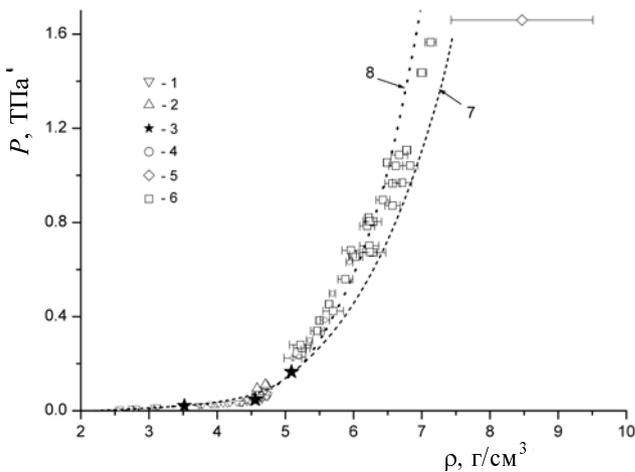


Рис. 1. Зависимость давления от плотности при ударном сжатии плавленного кварца $\rho_0 = 2,2$ г/см³. Значки – экспериментальные данные: 1 – [6], 2 – [7], 3 – [8], 4 – [9], 5 – [10], 6 – [4]. Расчетные зависимости: 7 – УРС SESAME 7386; 8 – УРС [3]

Причина отличий на рис. 1 рассчитанной по УРС мВдВ [3] ударной адиабаты от определенных из эксперимента [4] данных при высоких значениях давления (две точки при $P \approx 1,45 - 1,55$ ТПа) может состоять в следующем. Измеряемыми величинами в [4] являются скорость $D_{2,65}$ ударной волны в образце (“экране”) α -кварца $\rho_0 = 2,65$ г/см³ и скорость $D_{2,2}$ в расположенном за ним (по ходу волны) образце плавленного кварца $\rho_0 = 2,2$ г/см³.

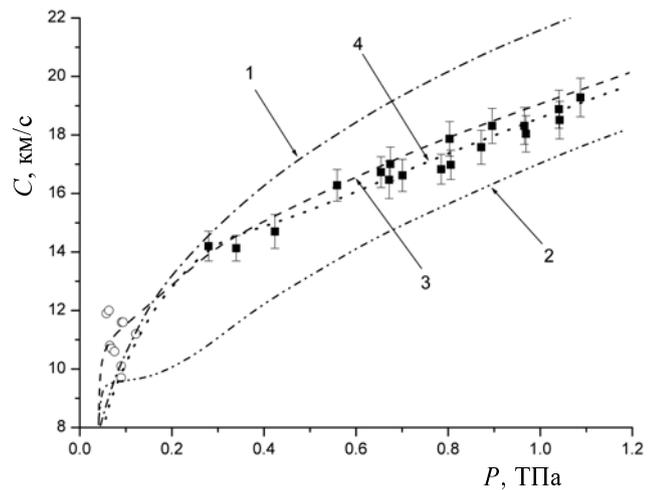


Рис. 2. Зависимость скорости звука от давления в состояниях, реализуемых при ударном сжатии плавленного кварца $\rho_0 = 2,2$ г/см³. Экспериментальные данные: кружки – [11], квадраты – [5]. Линии – расчетные зависимости: 1 – 2 – 3 – УРС SESAME 7381, 7385, 7386; 4 – УРС [3]

Расчет величин ρ , P по этим данным производится методом отражения с применением в [4] УРС α -кварца в форме Ми–Грюнайзена из работы [12]. В качестве опорной в этом уравнении используется аппроксимирующая экспериментальные данные $D_{EXP,2,65}(U)$ -зависимость (U – массовая скорость за фронтом ударной волны) α -кварца. В [4] в качестве нее использовалось приводимое в [12] соотношение ($[D]$, $[U]$ – км/с)

$$D_{EXP,2,65}(U) = 1,754 + 1,862U - 0,03364 U^2 + 0,0005666U^3, \quad (2)$$

построенное по данным [12, 13] в интервале $U \approx 4 - 20$ км/с. Отвечающая (2) $P(\rho)$ -зависимость приведена на рис. 3 (кривая 1). Значения плотности в состояниях при $P \approx 1,45 - 1,55$ ТПа на рис. 1 зависят от положения ударной адиабаты α -кварца на рис. 3 в интервале $P \approx 1,6 - 1,7$ ТПа (им соответствуют в (2) значения $U \approx 20 - 21$ км/с). Как видно из рис.3 кривая 1 при этих давлениях расположена в среднем правее двух “верхних” точек из [12, 13] и проходит практически точно через точку (заштрихованная звезда) с параметрами $\rho = 8,29$ г/см³, $P = 1,96$ ТПа из работы [8]. Эти параметры, полученные в [8] с применением излишне “мягкого” УРС Al (материал экрана, к которому примыкал образец α -кварца; при расчетах методом отражения используются экспериментально измеренные значения D в Al и α -кварце), были скорректированы в [3] с использованием более реалистичных УРС Al [14, 15]. Результат изобра-

жен на рис. 3 светлой звездой. Ее и две точки при максимальных значениях ρ, P из [12, 13] хорошо (в среднем лучше, чем кривая 1) описывает показанная на рис. 3 ударная адиабата, построенная на основе УРС [3] (кривая 2). При этом определенная на его основе ударная $D_{2,65}(U)$ -зависимость отличается от результата расчета с помощью формулы (2) на величину $<1\%$ по D при $U = \text{const}$ в интервале $U \approx 4 - 20$ км/с (максимальная разница $\approx 1\%$ имеется при $U \geq 20$ км/с). С помощью УРС [3] и результатов [4] (экспериментально зарегистрированных величин $D_{2,65}$ и $D_{2,2}$) методом отражения были получены скорректированные данные по ударному сжатию плавленого кварца. Результаты приведены на рис. 4. В скорректированном варианте положение точек изменилось незначительно (в пределах погрешности эксперимента) по сравнению с исходными данными [4] (рис. 1) в интервале $P \approx 0,3 - 1,1$ ТПа. Значения плотности в двух верхних точках (при $P \approx 1,45 - 1,55$ ТПа на рис. 4 и рис. 1), однако, ощутимо уменьшились. Как видно из рис. 4 эти точки хорошо описывает расчетная зависимость УРС [3]. На рис. 4 также приведена расчетная ударная адиабата плавленого кварца согласно УРС [2] (взята из [16, 17]). Вдоль нее в диапазоне $P \approx 0,2 - 1,6$ ТПа расчетная плотность в среднем завышена по сравнению с экспериментальной. То же самое имеет место вдоль модельной согласно [2] ударной адиабаты исходного α -кварца по отношению к данным [12, 13] (кривая 3 на рис. 3, заимствованная из [13]).

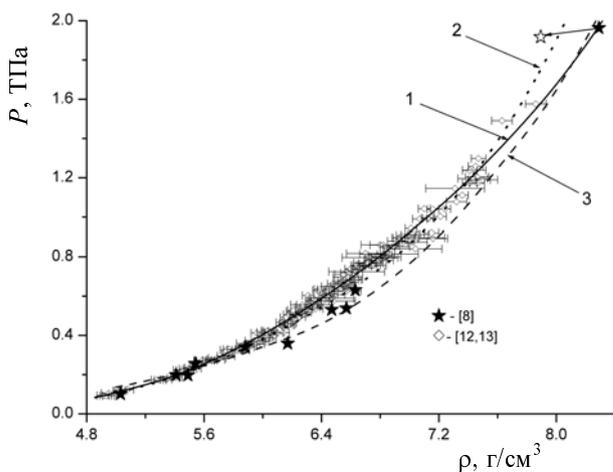


Рис. 3. Зависимость давления от плотности при ударном сжатии кварца $\rho_0 = 2,65$ г/см³. Значки – экспериментальные данные. Стрелкой показано смещение точки из [8] при использовании для Al УРС [14, 15]. Линии – расчет: 1 – с использованием формулы (2), 2 – УРС [3], 3 – УРС [2]

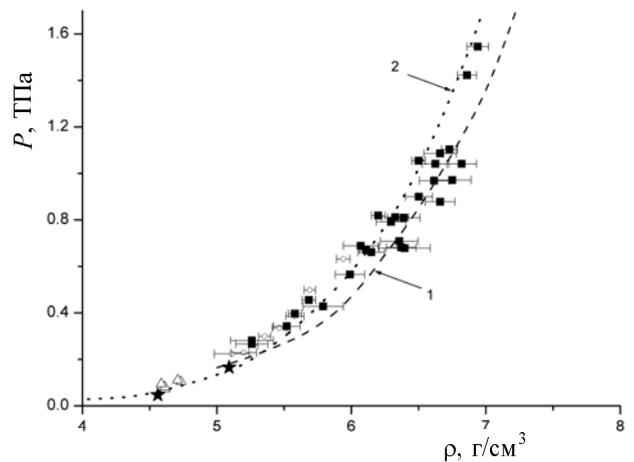


Рис. 4. Зависимость давления от плотности при ударном сжатии плавленого кварца $\rho_0 = 2,2$ г/см³. Обозначение экспериментальных данных аналогично использованному на рис. 1 за исключением того, что квадратами обозначены скорректированные с помощью УРС [3] данные [4]. Линии – расчет: 1 – УРС [2], 2 – УРС [3]

На рис. 5 приведено описание измерений температуры вдоль ударной адиабаты плавленого кварца с помощью УРС [2] и [3]. Расчетная зависимость [3] отличается от эксперимента максимально на $\approx 20\%$. Расхождение с ним модели [2] при некоторых давлениях несколько превышает это значение.

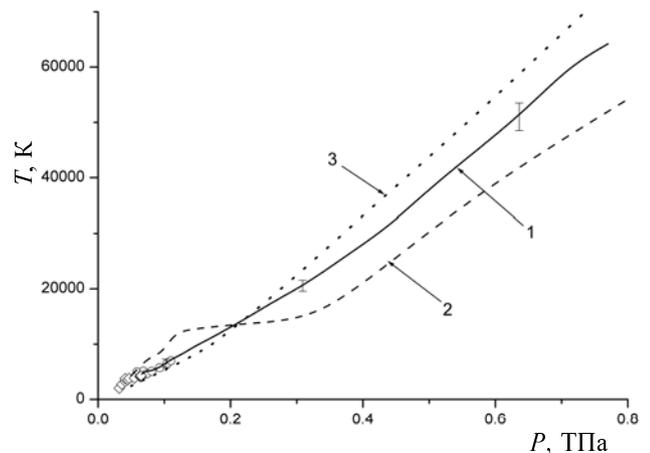


Рис. 5. Зависимость температуры от давления при ударном сжатии плавленого кварца $\rho_0 = 2,2$ г/см³. Экспериментальные данные: ромбы – [18], кружки – [19], сплошная линия 1 – [20]. Расчеты: 2 – УРС [2], 3 – УРС [3]

На рис. 6 показаны ударные адиабаты плавленого кварца при значениях давления до 1000 ТПа и изотермы $T = 10^6$ К, 10^7 К согласно УРС [2], УРС [3] и теоретической модели ТФПК [21, 22]. Наклон $P(\rho)$ -зависимости ТФПК при $P \approx 0,2 - 1,6$ ТПа меньше экспериментального (аналогичное свойст-

во проявляется для ударной адиабаты α -кварца). Вдоль ударной адиабаты максимальное отличие значения плотности между моделями [3] и [2] составляет $\approx 5\%$, между [3] и ТФПК – $\approx 10\%$.

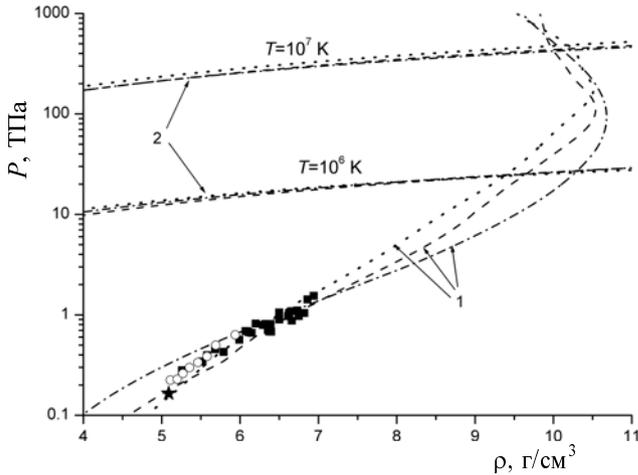


Рис. 6. Зависимости давления от плотности при ударном сжатии плавленого кварца $\rho_0 = 2,2 \text{ г/см}^3$ и вдоль двух расчетных изотерм. Обозначение экспериментальных данных аналогично использованному на рис. 4. Линии – расчетные зависимости: 1 – ударные адиабаты, 2 – изотермы $T = 10^6 \text{ К}$, 10^7 К . Штриховыми линиями обозначены расчеты по УРС [2], пунктирными – по УРС [3], штрих-пунктирными – по модели ТФПК

Рис. 7 демонстрирует поведение изэнтроп разгрузки, рассчитанных по вышеназванным моделям УРС (изэнтропа УРС [2] взята с графика, приведенного в [17]), из состояния, реализуемого при ударном сжатии плавленого кварца, которому соответствует значение $U = 150 \text{ км/с}$ (при этом внутренняя энергия по сравнению с исходной увеличивается на $1,125 \cdot 10^4 \text{ кДж/г}$). Согласно УРС [2] в этом состоянии $\rho = 10,36 \text{ г/см}^3$, $P = 63 \text{ ТПа}$, $T = 1,9 \cdot 10^6 \text{ К}$, согласно [3] – $\rho = 9,99 \text{ г/см}^3$, $P = 63,6 \text{ ТПа}$, $T = 1,86 \cdot 10^6 \text{ К}$, по модели ТФПК – $\rho = 10,65 \text{ г/см}^3$, $P = 62,6 \text{ ТПа}$, $T = 1,88 \cdot 10^6 \text{ К}$. При уменьшении давления первоначальное (соответствующее $P \approx 63 \text{ ТПа}$) взаиморасположение изэнтроп изменяется. В частности, при $P = 0,1 \text{ ТПа}$ согласно УРС [3] значение $\rho = 0,162 \text{ г/см}^3$, согласно модели ТФПК – $\rho = 0,158 \text{ г/см}^3$ (соотношение плотностей обратно первоначальному). При этом соответствующие этим моделям значения T равны $3,0 \cdot 10^5 \text{ К}$ и $3,2 \cdot 10^5 \text{ К}$, значения E (отсчитанные от значения E в нормальных условиях) – $1,65 \cdot 10^3 \text{ кДж/г}$ и $1,90 \cdot 10^3 \text{ кДж/г}$.

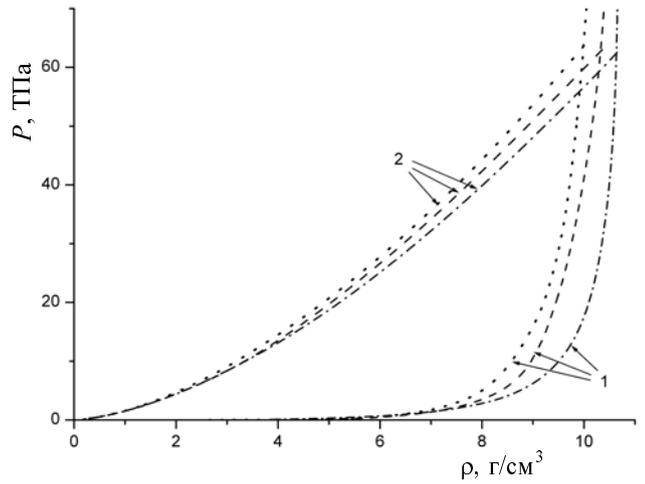


Рис. 7. Зависимости давления от плотности при ударном сжатии плавленого кварца $\rho_0 = 2,2 \text{ г/см}^3$ и изэнтропической разгрузке. Линии – расчетные зависимости: 1 – ударные адиабаты, 2 – изэнтропы из исходного состояния, отвечающего $U = 150 \text{ км/с}$. Штриховыми линиями обозначены расчеты по УРС [2], пунктирными – по УРС [3], штрих-пунктирными – по модели ТФПК

Основным итогом работы является следующее. Выполнено сопоставление расчетов, проведенных с помощью уравнения состояния диоксида кремния, построенного на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса, с новыми экспериментальными данными по ударному сжатию плавленого кварца до $1,6 \text{ ТПа}$ и скорости звука до $1,1 \text{ ТПа}$. Между ними имеется довольно хорошее соответствие, вследствие чего при реализованных в этих опытах величинах давления и плотности модельное уравнение состояния не требует существенной корректировки. Сравнение расчетных ударных адиабат плавленого кварца до 1000 ТПа по уравнению мВдВ и двум другим широкодиапазонным моделям, показывает, что максимальные отличия между ними составляют $\approx 10\%$ по плотности. Того же порядка отклонения в плотности между рассмотренными моделями имеются вдоль изэнтроп разгрузки, рассчитанных из исходного состояния с энергией ударного сжатия $1,125 \cdot 10^4 \text{ кДж/г}$.

Автор выражает благодарность Хрусталеву В. В. за предоставление результатов расчетов по модели ТФПК.

Список литературы

1. Lyon S. P., Johnson J. D. SESAME: The Los Alamos National Laboratory equation of state database. LANL Report No. LA-UR-92-3407, 1992.

2. Kerley G. Equations of state for composite materials / Kerley Publishing Services Report No. KPS99-4, 1999.
3. Медведев А. Б. Уравнение состояния диоксида кремния с учетом испарения, диссоциации и ионизации // Физика горения и взрыва, 2016. Т. 52. № 4. С. 101–114.
4. McCoy C. A., Gregor M. C., Polsin D. N., Fratanduono D. E., Celliers P. M., Boehly T. R., Meyerhofer D. D. Shock-wave equation-of-state measurements in fused silica up to 1600 GPa // J. Appl. Phys. 2016. Vol. 119. P. 215901.
5. McCoy C. A., Gregor M. C., Polsin D. N., Fratanduono D. E., Celliers P. M., Boehly T. R., Meyerhofer D. D. Measurements of the sound velocity of shock-compressed liquid silica to 1100 GPa // J. Appl. Phys. 2016. Vol. 120. P. 235901.
6. LASL Shock Hugoniot Data. Ed. Marsh S. P. Berkeley-Los Angeles-London: Univ. California Press. 1980.
7. Lyzenga G. A., Ahrense T. J., Mitchell A. C. Shock temperature of SiO₂ and their geophysical implications // J. Geophys. Res. 1983. Vol. 88, N. B3. P. 2431–2444.
8. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ: Справочник // Под ред. Трунина Р. Ф. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2006.
9. Qi T., Millot M., Kraus R., Root S, Hamel S. Optical and transport properties of dense liquid silica // Phys. Plasmas. 2015. Vol. 22. P. 062706.
10. Ragan III C. E. Shock compression measurements at 1 to 7 TPa. // Phys. Rev. A. 1982. Vol. 25, N. 6. P. 3360–3375.
11. McQueen R. G. The velocity of sound behind strong shocks in SiO₂. In: Shock Compression of Condensed Matter-1991. Ed. by Schmidt S. C., Dick R. D., Forber J. W., Tasker D. G. American Institute of Physics. 1992. P. 75–78.
12. Knudson M. D., Desjarlais M. P. Adiabatic release measurements in α -quartz between 300 and 1200 GPa: Characterization of α -quartz as a shock standard in the multimegabar regime // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 88. P. 184107.
13. Knudson M. D., Desjarlais M. P. Shock Compression of Quartz to 1.6 TPa: Redefining a Pressure Standard // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 103. P. 225501.
14. Медведев А. Б. Модель уравнения состояния с учетом испарения, ионизации и плавления // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1992. Вып. 1. С. 12–19.
15. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Каякин А. А., Куделькин В. Г. Модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Уравнения состояния Ta, W, Al, Be // Физика горения и взрыва. 2013, № 1. С. 106–120.
16. Millot M., Dubrovinskaja N., Cernok A., Blaha S., Dubrovinsky L., Broun D. G., Celliers P. M., Collins G. W., Eggert J. H., Jeanloz R. Shock compression of stishovite and melting of silica at planetary interior conditions // Science. 2015. Vol. 347, N. 6220. P. 418–420.
17. Kerley G. I. Equation of State and Constitutive Models for Numerical Simulations of Dust Impacts on the Solar Probe. Report on Contract #949182. Johns Hopkins University Applied Physics Laboratory Laurel, Maryland, Kerley Technical Services, Appomattox, VA, 2009.
18. Sugiura H., Kondo K., Sawaoka A. Shock temperatures in fused silica measured by optical technique // J. Appl. Phys. 1982. Vol. 53, N. 6. P. 4512–4514.
19. Lyzenga G. A., Ahrense T. J., Mitchell A. C. Shock temperature of SiO₂ and their geophysical implications // J. Geophys. Res. 1983. Vol. 88, N. B3. P. 2431–2444.
20. Hicks D. G., Boehly T. R., Eggert J. H., Miller J. E., Celliers P. M., Collins G. W. Dissociation of liquid silica at high pressures and temperatures // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97(2). P. 025502.
21. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества. Численные методы механики сплошных сред: Сборник научн. трудов. Новосибирск. 1977. Т. 8, № 6. С. 54–67.
22. Калиткин Н. Н. Модель атома Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1960. Т. 38. Вып. 5. С. 1534–1540.

Статья поступила в редакцию 02.02.2017