

ФГУП

ISSN 0234-0763

«РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР – ВНИИЭФ»

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Теоретическая и прикладная
физика

ВЫПУСК 3

2022

Ф Г У П

«РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР – ВНИИЭФ»

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

**Теоретическая и прикладная
физика**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 3

Издается с 1984 г.

Саров – 2022

Уважаемые читатели!

Редакция н/г сборника «Вопросы атомной науки и техники» серии «Теоретическая и прикладная физика» информирует о том, что начиная со 2-го полугодия 2008 г. журнал распространяется согласно новым правилам подписки.

Теперь подписаться на сборник можно во всех отделениях связи России по каталогу Агентства «Роспечать», раздел «Периодические издания НТИ», подписной индекс 72246.

Цена одного журнала – 200 руб.

В год издается 4 выпуска.

По всем вопросам обращаться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, ИТМФ.

Редакция журнала ВАНТ, сер. «Теоретическая и прикладная физика».

Тел. (83130)7-54-96; e-mail: kul@otd68.vniief.ru

И. о. главного редактора Б. А. Надыкто

Редакционная коллегия:

В. А. Жмайло, П. А. Лобода, Н. В. Лычагина –
ответственный секретарь, А. В. Певницкий,
В. А. Симоненко, В. П. Соловьев, А. К. Чернышев

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДОРОДА ИСХОДЯ ИЗ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто

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

Термодинамические свойства различных изотопов водорода в экстремальных условиях критически важны для физики плазмы, включая термоядерный синтез с инерционным удержанием (ICF), и астрофизики, включая теплое плотное вещество (WDM). Основная проблема при расчете термодинамических свойств водородной плазмы состоит в том, что ее статистическая сумма (СС) с энергетическими уровнями свободных атомов H расходится. Здесь мы показываем, что СС атомов H с уровнями энергии, учитывающими конечный размер атомной ячейки в экстремальных условиях, сходится и, таким образом, может использоваться для прямых вычислений соответствующих термодинамических функций с очень низкими вычислительными затратами. Конечная СС была использована для получения универсального уравнения состояния (УРС) водорода в широком диапазоне параметров. Получено УРС, которое адекватно описывает состояние водорода во всем диапазоне плотностей и температур, включая холодную кривую. Показано, что новый УРС хорошо согласуется с имеющимися измерениями и расчетами, выполненными с использованием самых современных вариантов теории функций плотности (DFT) и квантовых методов Монте-Карло. Это означает, что новый подход представляет собой жизнеспособную недорогую альтернативу вышеупомянутым традиционным методам, вычислительные затраты которых во многих случаях непомерно высоки. Поскольку сходящаяся СС и соответствующие термодинамические функции были выведены в аналитической форме, полученные формулы могут использоваться при моделировании множества процессов и систем, играющих важную роль в физике плазмы и астрофизике, включая ICF и WDM.

Ключевые слова: статистическая сумма, неидеальная водородная плазма, теплая плотная материя, инерциальный термоядерный синтез.

1. Введение

Уравнение состояния (УРС) и термодинамические свойства различных изотопов водорода в широком диапазоне температур и давлений критически важны для физики плазмы, астрофизики, термоядерного синтеза с инерционным удержанием (ICF) и теплой плотной материи (WDM) [1–12]. Например, для изучения ICF необходимы уравнение состояния и термодинамические свойства водорода при экстремальных температурах и давлениях [1–5]. В случае воспламенения ICF дейтерий-тритиевая капсула сжимается до высоких плотностей и температур либо непосред-

ственно мощным лазерным импульсом, либо косвенно путем генерации рентгеновских лучей в замкнутом объеме (hohlraum). Во время воспламенения ICF этот дейтерий должен быть сжат до плотности в несколько 100 г/см^3 и нагрет до нескольких кэВ. УРС водорода также необходим для изучения условий внутри планет-гигантов, таких как Юпитер, Сатурн, Уран, Нептун, которые состоят в основном из водорода [6–8]. В то время как плотность внутри этих планет высока из-за гравитационного сжатия, температуры внутри них намного ниже, чем во время термоядерного синтеза. Получение точного широкодиапазонного уравнения состояния водорода необходимо для полу-

чения глубокого и ясного понимания этих астрофизических объектов, потому что размер и распределение массы планет очень чувствительны к уравнению состояния водорода в широком диапазоне параметров температуры и давления.

Неидеальная плазма, в которой сильно влияние электрон-ионного взаимодействия на свойства плазмы, характеризуемое параметром $\Gamma > 1$, называется теплой плотной материей (WDM) [6–12]. В WDM электронные возбуждения и частичная ионизация сильно влияют на его свойства. Получение достоверной информации об УРС WDM и электропроводности WDM в широком диапазоне параметров является совершенно необходимым [6–12]. Однако эксперименты по WDM чрезвычайно сложны, очень редки и, таким образом, имеющиеся в настоящее время экспериментальные данные, которые обычно получают при использовании импульсного электрического разряда для получения плазмы и измерения электрического тока, скудны [6, 7]. Теория МВД разработана лучше, и перечень вычислительных методов, используемых в настоящее время для изучения МВД, включает квантовую молекулярную динамику QMD [8], модель среднего атома (AAM) [9], модель плазмообразования (PF) [10] и химическую модель (CM) [11, 12]. Однако вышеупомянутые методы довольно требовательны к вычислительным ресурсам, что делает затраты на вычисления, связанные с их использованием, очень большой проблемой.

Ясно, что получение глубокого и ясного понимания свойств водорода в широком диапазоне температур и давлений является критически важным. Однако в настоящее время это связано с рядом трудностей и большой неопределенностью как в теории, так и в экспериментах. В частности, эксперименты с водородом при высоких и экстремальных температурах и давлениях очень сложны и связаны с большой неопределенностью, расчеты же требуют больших вычислительных мощностей и больших вычислительных затрат, которые во многих случаях непомерно высоки.

Хорошо известно, что основная проблема при расчете термодинамических свойств водородной плазмы состоит в том, что ее статистическая сумма (СС) с уровнями энергии свободных атомов водорода, когда пространство, занимаемое одним атомом водорода, считается бесконечным, расходится. Основная проблема здесь заключается в том, что СС для свободных атомов H не учитывает влияние соседних атомов, что важно в случае, когда плотность водорода высока, а размер элементарной ячейки, содержащей один атом H, конечен.

Здесь мы показываем, что статистическая сумма атомов водорода с уровнями энергии, учитывающими конечный размер атомной ячейки, сходится, и таким образом, может быть использована для прямых расчетов соответствующих термодинамических функций. Чтобы преодолеть проблему расходимости СС для водорода, мы используем подход [14], в котором энергетические уровни водорода были скорректированы с учетом конечного объема, приходящегося на атом водорода.

В этом случае размер элементарной ячейки, содержащей один атом H, определяется исключительно удельным объемом/плотностью плазмы. Статистическая сумма водорода при этом конечна при любых температуре и давлении. Она явно зависит от плотности и температуры и, таким образом, может использоваться для расчетов термодинамических свойств. Поскольку сходящиеся СС и соответствующие им термодинамические функции могут быть получены в аналитическом виде, их можно использовать при моделировании различных процессов и систем, играющих важную роль в физике плазмы и астрофизике, ICF и WDM при малых вычислительных затратах с типичным расчетом, занимающим от нескольких секунд до нескольких минут на персональном офисном компьютере. Мы также показали, что нелинейное поведение термодинамических функций при малых плотностях связано с электронными возбуждениями, которые приводят к переходу от уравнения состояния идеального газа, определяемого одной нейтральной частицей, к уравнению состояния, определяемому независимым движением ядра и электронов, и что нелинейность при высоких плотностях контролируется нелинейным поведением потенциала взаимодействия или упругого/холодного давления. Тщательная оценка результатов этой работы путем сравнения их с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими предсказаниями, полученными с использованием различных методов, показывает хорошее совпадение и указывает на то, что предлагаемый подход является жизнеспособной недорогой альтернативой традиционным методам, широко используемым в этой области, таким как [8–12].

2. Электронная статистическая сумма атомарного водорода

Статистическая сумма Z водородной плазмы записывается следующим известным уравнением [15]:

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right), \quad (1)$$

где n – главное квантовое число, E_n – энергия состояния с данным n , k – постоянная Больцмана, $\Theta = kT$ выражается в тех же единицах, что и E_n , T – температура. СС рассчитывается для одной атомной ячейки объемом V_0 и ее значение для N атомов, занимающих объем $V = N V_0$, равно Z^N .

В случае свободного атома энергия в атомных единицах $\frac{e^2}{a_0}$ равна:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}. \quad (2)$$

Хорошо известно, что в случае, когда используются энергетические уровни свободного атома водорода (2), СС расходится из-за того, что его члены растут как $Z_n \sim n^2$ при больших n . В этом случае СС нельзя использовать для прямых расчетов термодинамических свойств и уравнения состояния. Причина наблюдаемой расходимости ясна, поскольку в случае плазмы, в которой объем, приходящийся на один атом водорода, конечен и зависит от плотности плазмы, взаимодействие с соседними атомами изменяет энергию электронов в элементарных атомных ячейках и, таким образом, использование энергетических уровней для свободных атомов водорода явно неоправданно. Для устранения расходимости СС водорода применяются искусственные приемы, не имеющие физического смысла. Обычно расходимость СС устраняется за счет введения весовых множителей w_n таких, что $w_n \Rightarrow 0$ при $n \Rightarrow \infty$ [15–20].

Ключевой недостаток традиционного подхода, такой как независимость энергетических уровней сжатого водорода и СС водородной плазмы от плотности, был исправлен в работе [14], в которой явно объясняется влиянием сжатия атома как на энергетические уровни, так и на возникающие СС. Вместо деления частиц в плазме на атомы, ионы и электроны модель [14] рассматривает электрически нейтральные атомные ячейки, содержащие возбужденные электроны и ядра. Электроны всегда остаются внутри атомной ячейки; однако радиус орбиты электрона r уменьшается с увеличением плотности водорода. Уровни энергии сжатых атомов водорода [21–23] явно учитывают конечный размер элементарной атомной ячейки и определяются следующим уравнением (в атомных единицах):

$$E_n(x) = \frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}, \quad (3)$$

где x – параметр однопараметрической водородоподобной пробной волновой функции [24]

$$R_{nl} = -\left(\frac{(n-l-1)!}{(n-l)!^3 2n}\right)^{1/2} \left(\frac{2n}{x}\right)^{3/2} e^{-nr/x} \times \left(\frac{2nr}{x}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2nr}{x}\right), \quad (4)$$

а $L_k^m(t) = \frac{d^m L_k(t)}{(dt)^m}$ – обобщенные полиномы Лагерра, $L_k(t) = e^t \frac{d^k e^{-t} t^k}{(dt)^k}$.

Выражение (3) может быть получено как из вариационного решения уравнения Шредингера с однопараметрическими водородоподобными пробными волновыми функциями [24], так и из боровского квантования орбитального момента $mvr = n\hbar$, где m – масса электрона, v – скорость электрона. В случае, когда радиус r_{WS} сферической ячейки Вигнера–Зейтца, содержащей один атом водорода, конечен и зависит от плотности водорода $x_n = r_{WZ}/a_0$, он определяется с помощью смешанного граничного условия на границе ячейки

$$\left.\frac{\partial(rR_{n-1})}{\partial r}\right|_{r=r_{WZ}} = 0,$$

где R_{n-1} – радиальная волновая функция для состояния с наибольшим при данном n значением орбитального квантового числа (и $j = n - 1/2$). Это условие сводится к выражению

$$\left.\frac{\partial\left(r^n e^{-\frac{nr}{x}}\right)}{\partial r}\right|_{r=r_{WZ}} = nr^{n-1} e^{-\frac{nr}{x}} - \frac{n}{x} r^n e^{-\frac{nr}{x}} \Big|_{r=r_{WZ}} = 0,$$

которое дает $x = r_{WZ}/a_0$, где a_0 – радиус Бора (первой боровской орбиты водорода).

В случае использования теории Бора x_n для сжатых атомов водорода также определяется радиусом ячейки Вигнера–Зейтца. Когда электрон находится внутри сжатой ячейки, радиус его орбиты r при сохранении орбитального момента уменьшается по мере роста плотности водорода и,

таким образом, ячейка Вигнера–Зейтца сжимается. В случае свободного атома $x_n = n^2$ определяется из условия минимума энергии $\partial E / \partial x = 0$ и дает классические энергетические уровни $E_n = -1/2n^2$ (в атомных единицах).

Уравнение (3) при $x = \text{const}$ дает энергию одного атома в твердом теле [21]:

$$E(x) = 2E_0 \left(\frac{x_n^2}{2x^2} - \frac{x_n}{x} \right) = 2E_0 \left(\frac{\sigma^{2/3}}{2} - \sigma^{1/3} \right), \quad (5)$$

где x_n и E_0 относятся к состоянию равновесия при $P = 0$, $\sigma = \frac{\rho}{\rho_0}$, ρ_0 – плотность при $P = 0$.

В равновесии энергия атома минимальна. Статическое сжатие приводит к увеличению энергии атома, в результате чего возникает упругое (холодное) давление, выражаемое формулой:

$$P(\sigma) = 3B_0 \left(\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3} \right), \quad (6)$$

которая хорошо согласуется с экспериментом [21–23]. Здесь $B_0 = \frac{2E_0 N_A \rho_0}{9A}$ – объемный модуль, N_A – число Авогадро и A – атомная масса.

При $r/a_0 > n^2$, как и в [19], используются уровни энергии свободного атома, а при $r/a_0 < n^2$ расчет энергии атома осуществляется с использованием сжатой ячейки Вигнера–Зейтца (3). Статистическая сумма (1) с уровнями энергии (3) выражается как

$$Z = \sum_1^{\sqrt{x}} 2n^2 \exp\left(\frac{1}{2n^2 \Theta}\right) + \sum_{\sqrt{x+1}}^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{1}{\Theta} \left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x} \right)\right). \quad (7)$$

Здесь $\Theta = kT$ выражено в атомных единицах.

Первый член в правой части уравнения (7) относится к уровням энергии свободных атомов, а второй – к уровням энергии сжатых атомов, описываемым уравнением (5). Статистическая сумма (7) является функцией как температуры, так и объема, что позволяет проводить прямые расчеты термодинамических свойств водородной плазмы и сходится при любых параметрах плазмы. Для состояний с $n > \sqrt{2x}$ уравнение (3) при $x = \text{const}$ дает

$E_n > 0$, следовательно, при больших n члены статистической суммы Z_n экспоненциально убывают.

В случае, когда нижние связанные состояния мало заселены и в то же время общее число энергетических уровней велико, суммирование в уравнении (7) можно заменить интегрированием. В результате получаем:

$$Z = \int_0^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right) dn = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(2x^2 \Theta\right)^{3/2} \exp\left(\frac{1}{x\Theta}\right). \quad (8)$$

Конечная статистическая сумма Z , выраженная уравнением (7), позволяет проводить прямые расчеты различных свойств водородной плазмы, широко используемых в физике плазмы, астрофизике, термоядерном синтезе с инерционным удержанием (ICF) и теплой плотной материи (WDM), таких как свободная энергия Гельмгольца F , давление P , энтропия S , свободная энергия Гиббса G и многие другие.

Зависимость членов статистической суммы Z_n от главного квантового числа n показана на рис. 1. При $n \leq \sqrt{x}$ Z_n являются членами СС свободного атома. Они растут при $n > 2$ с ростом главного квантового числа (штриховая кривая). При переходе к уровням энергии сжатого атома ($n > \sqrt{x}$) Z_n сначала продолжают расти, достигают максимума, а затем быстро уменьшаются.

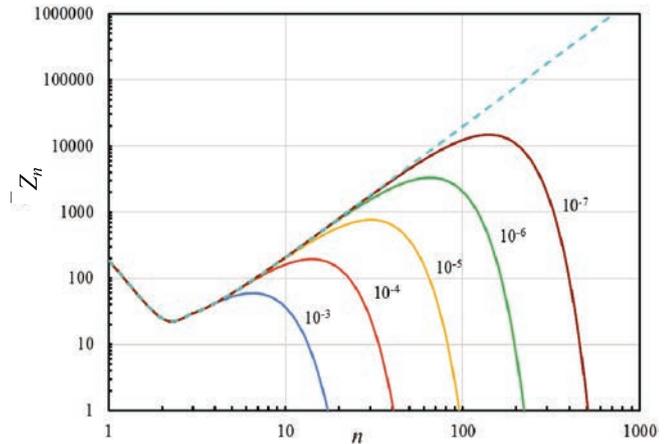


Рис. 1. Зависимость от n членов статистической суммы Z_n при температуре 3 эВ и различных плотностях (10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} , 10^{-6} , 10^{-7} г·см $^{-3}$). Сплошные и штриховые линии относятся к сжатым и свободным атомам соответственно

3. Расчет электронной теплоемкости

Средняя энергия электронов в плазме равна:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^{\infty} 2n^2 E_n \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right). \quad (9)$$

Для электронной теплоемкости при постоянном объеме получается выражение:

$$c_v = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}\right)_V = k \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{\Theta^2}, \quad (10)$$

где $\langle E \rangle$ – среднее значение энергии электрона в условиях термодинамического равновесия, $\langle E^2 \rangle$ – среднее значение квадрата энергии электрона. Изобарная теплоемкость определяется выражением:

$$c_p = c_v + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P.$$

Рассчитанная таким способом изохорная теплоемкость водорода показана на рис. 2 и 3. На рис. 2 показаны зависимости изохорных электронных теплоемкостей атомарного водорода от плотности при различных значениях температуры. При низкой плотности электронная теплоемкость стремится к $3k/2$, как в идеальном газе, что связано с возбуждением электронов в этих условиях. С увеличением плотности кривые $c_v(\rho)$ имеют максимум, величина которого тем больше, чем меньше плотность плазмы. После точки максимума с увеличением плотности значение электронной теплоемкости уменьшается, приближаясь к нулю. Сильное изменение теплоемкости является причиной нелинейного поведения давления в неидеальной плазме.

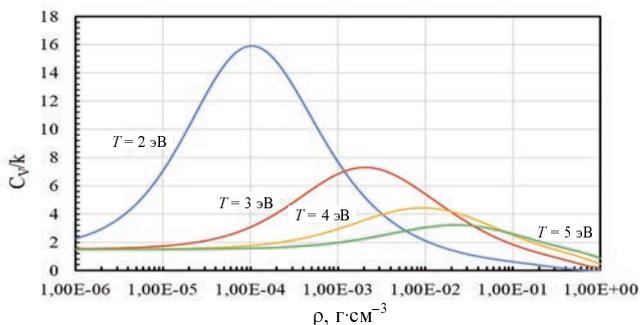


Рис. 2. Зависимость электронной теплоемкости атомарного водорода от плотности при различных значениях температуры (2, 3, 4, 5 эВ)

Согласно расчетам при плотности 10^{-4} г·см⁻³ и температуре 2 эВ внутренняя энергия электро-

нов водородной плазмы примерно в 10 раз превышает значение $3kT/2$.

На рис. 3 показаны зависимости изохорных электронных теплоемкостей атомарного водорода от температуры при различных значениях плотности. При низких значениях температуры электронная теплоемкость стремится к нулю, при высоких – к $3k/2$.

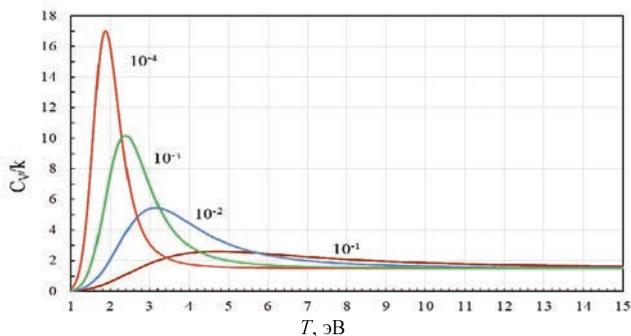


Рис. 3. Зависимость электронной теплоемкости от температуры при разных значениях плотности (10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} г/см³)

Максимум в теплоемкости газов при высокой температуре обычно получают в химической модели тепловой ионизации (уравнение Саха), когда рассматривается химическое равновесие нейтральных атомов, свободных электронов и ядер. Эта модель дает результаты, близкие с нашими результатами, хотя имеются некоторые различия по величине и ширине максимума. Понятие свободных не взаимодействующих с ядром электронов является явным упрощением процессов в плазме, так как электроны находятся всегда на расстоянии от ядра, не меньшем радиуса электрически нейтральной ячейки Вигнера–Зейтца, и всегда взаимодействуют с ядром.

В пределе большого числа заселяемых уровней можно перейти при вычислении физических величин от суммирования к интегрированию. В результате получаем:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} \Theta - \frac{1}{x}. \quad (11)$$

В этом предельном случае теплоемкость электронов, распределенных по большому числу дискретных состояний, совпадает с теплоемкостью классического идеального газа. В разреженной плазме, когда энергия электростатического взаимодействия мала по сравнению с тепловой энергией, электронная составляющая давления также описывается уравнением состояния классического идеального газа. Этот результат можно считать

подтверждением принципа соответствия Бора, согласно которому квантовая теория приближается к классической, когда разность энергий стационарных состояний становится малой.

3.3. Расчет давления

После диссоциации молекулы водорода статистическая сумма равна произведению электронной статсуммы и статсуммы поступательного движения ядра (в твердом теле колебательного движения). Величины давления и энтропии определяются через производные свободной энергии $F = -N\Theta \ln Z$. Для давления получаем:

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{N\Theta}{V} \left[1 + \frac{1}{3\Theta Z} \sum_{x=1}^{\infty} 2n^2 \left(\frac{n^2}{x^2} - \frac{1}{x} \right) \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right) \right]. \quad (12)$$

Первый член в (12) связан с движением ядра (в тяжелых атомах – атомного остатка), второй – с заселенностью электроном возбужденных состояний атома.

Расчитанные по формуле (12) зависимости давления от температуры при различной плотности водорода (1, 2, 3, ..., 10, 11, 12, 13, 14)·10⁻³ г·см⁻³ показаны на рис. 4. В качестве примера на верхней кривой маркерами показаны расчетные точки. Расчет сотен точек занимает несколько минут персонального компьютера. На рис. 4 ясно виден переход от сжатия идеального газа нейтральных атомов при низких температурах к сжатию идеального газа с удвоенным количеством частиц (ядер и электронов) после полной ионизации атомов. Переходная нелинейная область неидеальной плазмы занимает достаточно узкий интервал температур.

На рис 5 показаны зависимости давления от температуры при плотности водорода 10⁻² г·см⁻³. Прямые линии – асимптоты при низких и высоких температурах.

Нелинейное поведение давления при низких плотностях связано с электронными возбуждениями, которые дают переход от уравнения состояния, определяемого движением в атомной ячейке одной нейтральной частицы к уравнению состояния, определяемого независимым движением ядра и электрона. При высоких плотностях нелинейность определяется нелинейным поведением потенциала взаимодействия.

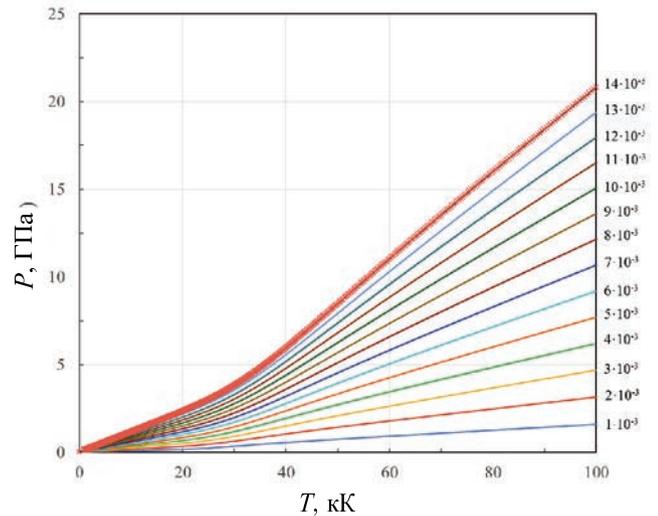


Рис. 4. Зависимость давления от температуры при плотности водорода (1, 2, 3, ..., 10, 11, 12, 13, 14)·10⁻³ г·см⁻³. В качестве примера на верхней кривой маркерами показаны расчетные точки. Для всех кривых точки рассчитываются при одних и тех же значениях температур

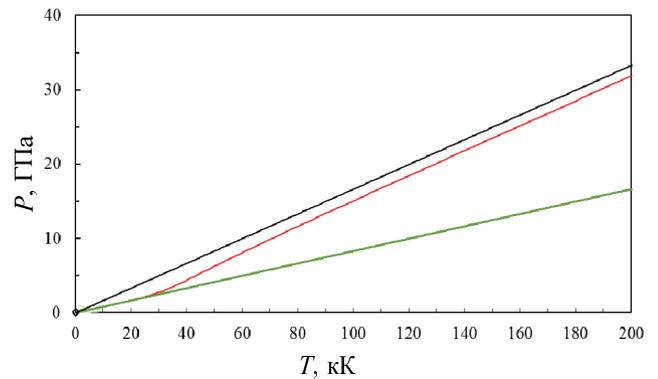


Рис. 5. Зависимость давления от температуры при плотности водорода 10⁻² г·см⁻³. Прямые линии – асимптоты при низких и высоких температурах

На рис. 6 показаны зависимости от температуры производных $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$, т. е. вдоль изохор.

Кривые на рис. 6 приведены для тех же плотностей, что и на рис. 4. Рис. 6 показывает, что нелинейная область перехода от уравнения состояния идеального газа слабо возбужденных нейтральных атомов к уравнению состояния идеального газа с удвоенным числом независимо движущихся частиц, атомного остатка (ядра) и электрона, достаточно узкая (15–30 кК при плотности 10⁻³ г·см⁻³, 20–40 кК при 10⁻² г·см⁻³). Перед выходом на уравнение состояния полностью ионизованного газа производные $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$ имеют слабо выраженный максимум.

На рис. 7 показаны зависимости давления от плотности при различных значениях температуры. При низких плотностях обычно достигается полная ионизация. При высоких плотностях число свободных электронов уменьшается, приближаясь к нулю. Поэтому наклон $\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T$ при малых плотностях в два раза выше, чем асимптотически при больших плотностях.

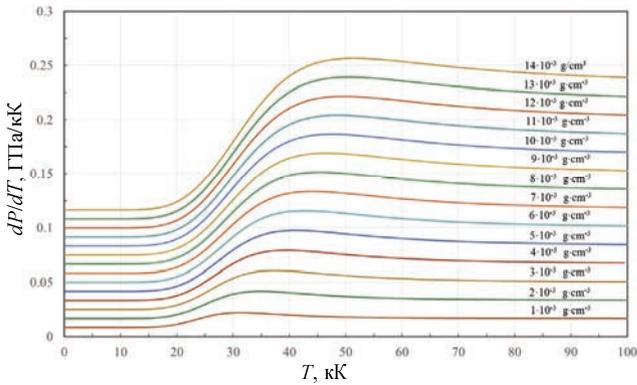


Рис. 6. Зависимость производных $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$ от температуры при плотности водорода $(1, 2, 3, \dots, 10, 11, 12, 13, 14) \times 10^{-3} \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$

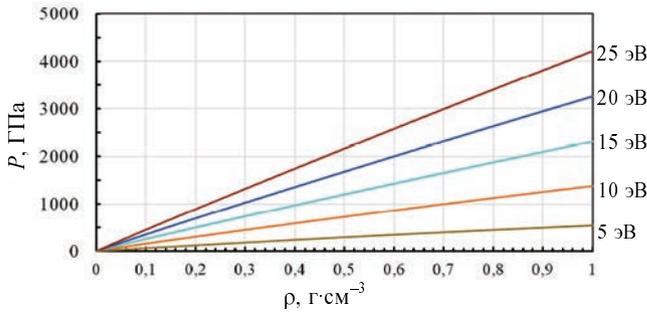


Рис. 7. Зависимость давления от плотности при разных температурах водорода (5, 10, 15, 20, 25 эВ)

3.4. Сравнение расчетного давления с экспериментами в парах металлов

Расчетные кривые давления на рис. 4, 7 можно перестроить в зависимости от температуры при разных значениях молярного объема или числа атомов в единице объема. В этом случае экспериментальные данные [6] по давлению в парах различных металлов (В, Al, Si, Fe, Cu, W, Au) при одинаковом молярном объеме и температуре близки к результатам наших расчетов для водородной плазмы. Это можно объяснить тем, что в

условиях термодинамического равновесия между электронами и излучением при высоких температурах основной вклад в статистическую сумму дают возбужденные состояния с большим значением главного квантового числа n . Эти состояния с возбуждением одного электрона для всех элементов являются водородоподобными [19]. Отличие уровней энергии состояния с малыми n от уровней энергии водорода легко может быть учтено на основании экспериментальных данных [27, 28].

Сравнение результатов расчетов уравнения состояния (5) паров металлов со значением ρ/A в интервале $0,0017 - 0,011 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ показывает, что результаты близки к экспериментальным данным [6]. Преимуществом нашего метода является его ясность и чрезвычайная дешевизна и доступность расчетов. Расчет при постоянной плотности 1000 точек по температуре занимает минуты персонального компьютера. В [6] приведены отдельные точки (числом от 6 до 9), рассчитанные в рамках квантовой молекулярной динамики (QMD). Они выше данных эксперимента [6] и результатов наших расчетов, как правило, на 10–20%. При сравнении следует учитывать, что ошибки эксперимента не менее 15%, как и ошибки QMD. Точки QMD рассчитаны в [6] в узком интервале температур (до 30–40 кК). Экспериментальные точки [6] находятся в еще более узкой области (13–30 кК). В этой области точки описываются либо уравнением состояния идеального газа слабо возбужденных нейтральных атомов, либо они расположены на начальном нелинейном участке перехода к высоким возбуждениям или к ионизации атома. В пределе больших возбуждений происходит переход к уравнению состояния идеального газа с удвоенным числом независимо движущихся частиц, атомного остатка (ядра) и электрона. Наши расчеты более явно фиксируют этот переход по сравнению с расчетами QMD, по-видимому, и из-за малого числа точек QMD [6].

Результаты сравнения расчетов давления в парах металлов при высокой температуре по уравнению (12) с экспериментом [6] показаны на рис. 8. На рис. 8 сплошной линией показаны результаты наших расчетов, квадратами показаны точки QMD [6], штриховой линией – результаты расчетов методом среднего атома (ААМ) [29]. Уравнение (12) наиболее близко описывает эксперимент [6] для В, Ti, Ni, Ag. Данные QMD [6], как правило, выше на 10–20%. Результаты расчетов ААМ [29] еще выше, особенно в области низких температур. В наших расчетах для Au начало нелинейного участка зави-

симости $P(T)$ сдвинуто в сторону больших температур примерно на 3000 К. Экспериментальные данные для Al, Si и Cu рис. 9 располагаются ниже линии одноатомного идеального газа и, соответственно, ниже наших расчетов, расчетов QMD и, тем

более, ААМ [29]. В принципе это можно было бы объяснить влиянием связывания атомов в димерные молекулы или в кластеры, содержащие большее число атомов. Однако вблизи начала ионизации процессы диссоциации обычно заканчиваются.

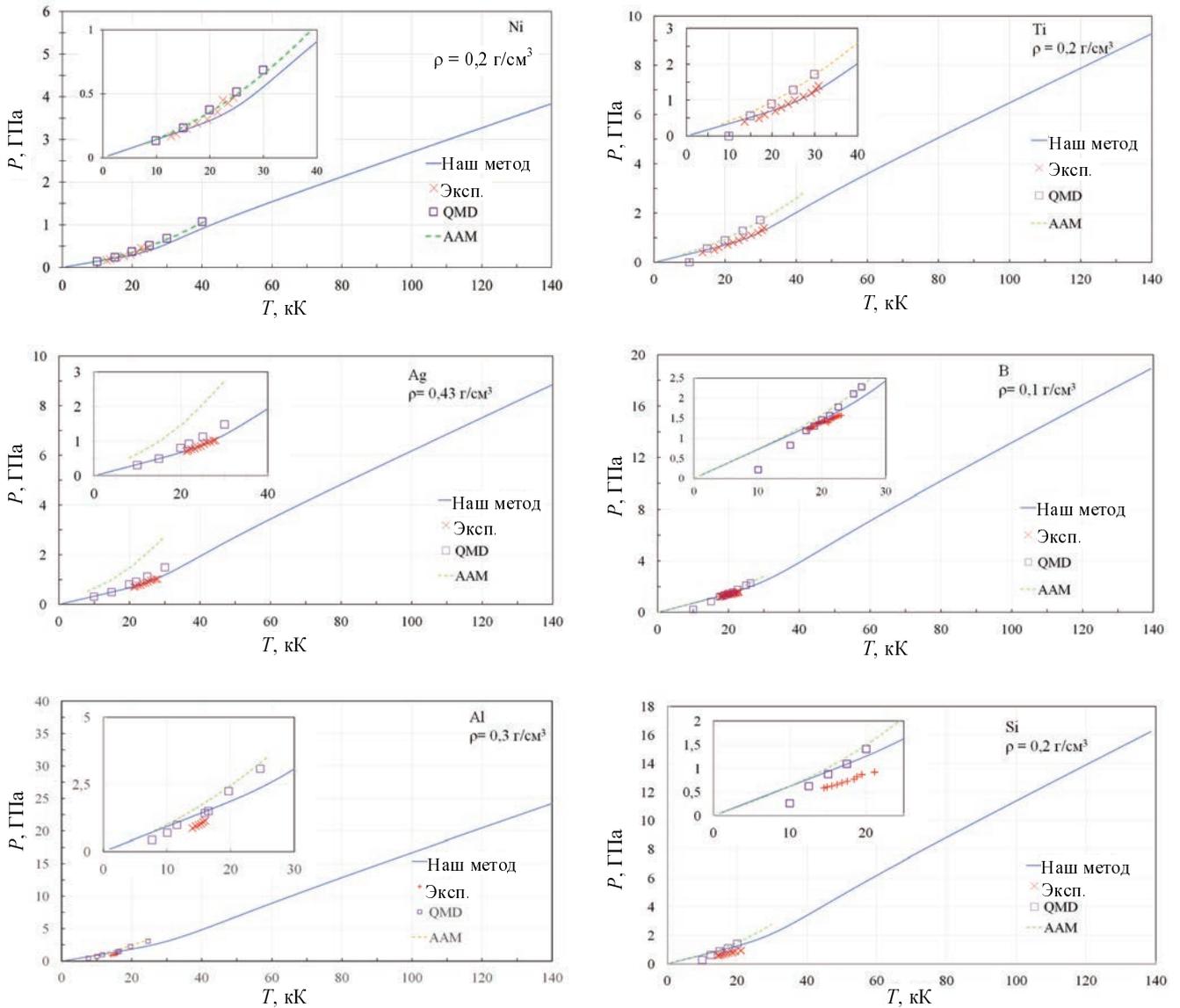


Рис. 8. Результаты сравнения расчетов давления в парах Ni (0,2), Ti (0,2), Ag (0,43), В (0,1), Al (0,3), Si (0,2) при высокой температуре по уравнению (12) с экспериментом [6]. В скобках за знаком элемента приведена плотность в г/см^3

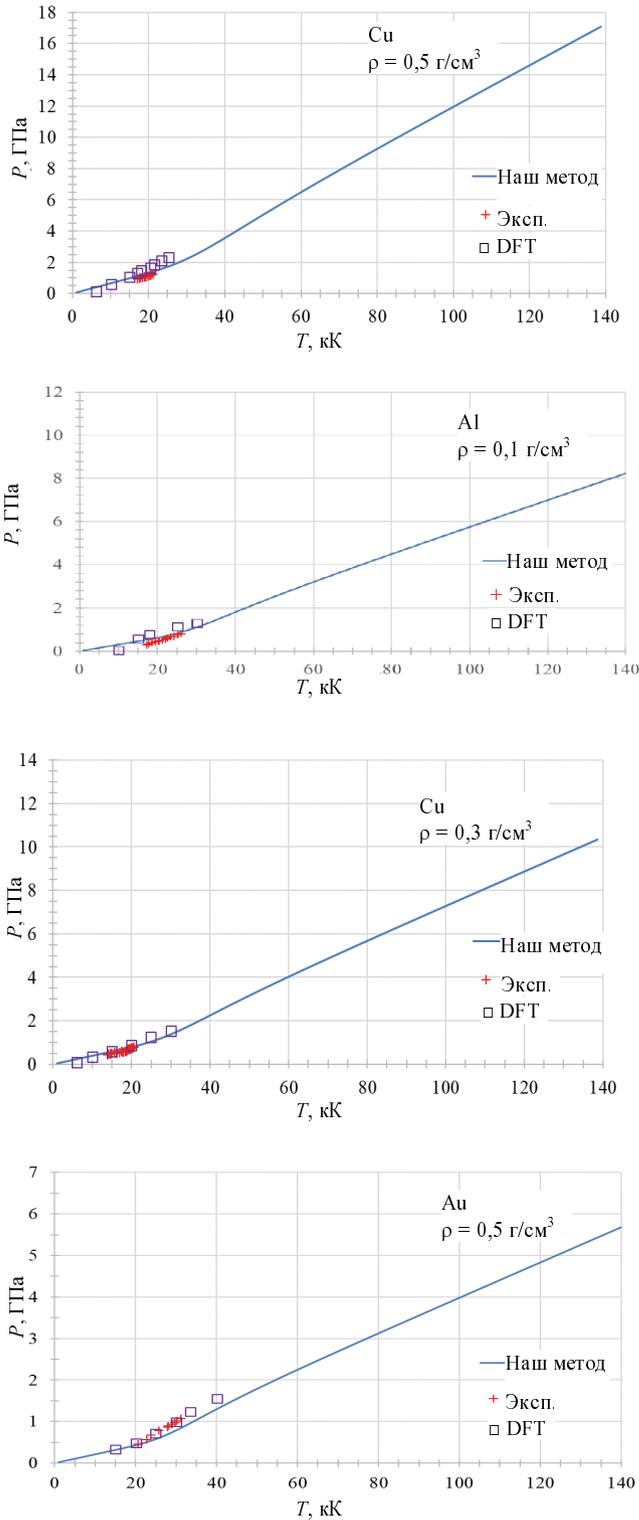


Рис. 9. Результаты сравнения расчетов давления в парах Cu (0,5), Al (0,1), Cu (0,3), Au (0,5) при высокой температуре по уравнению (12) с экспериментом [6]. В скобках за знаком элемента приведена плотность в г/см^3

3.5. Расчет энтропии

Энтропия электронов определяется через величину СС выражением:

$$S = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = Nk \ln Z + \frac{NT}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial T} \right)_V = Nk \ln Z + N \frac{\langle E \rangle}{T}.$$

В случае, когда $\frac{1}{x\Theta} \ll 1$ (Θ и $\frac{1}{x}$ в атомных единицах) имеем:

$$\ln Z = \ln \sqrt{2\pi} + \ln(x^2 \Theta)^{3/2} + \frac{1}{x\Theta};$$

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} \Theta - \frac{1}{x} = \Theta \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{x\Theta} \right);$$

$$N \frac{\langle E \rangle}{T} = \frac{3}{2} Nk - \frac{Nk}{x\Theta};$$

$$S = Nk \ln(x^3 \Theta^{3/2} \sqrt{2\pi}) + \frac{Nk}{x\Theta} + \frac{3}{2} Nk - \frac{Nk}{x\Theta};$$

$$S = Nk \left(\ln(x^3 \Theta^{3/2} \sqrt{2\pi}) + \frac{3}{2} \right) =$$

$$= Nk \ln(x^3 \Theta^{3/2} e^{3/2} \sqrt{2\pi}) =$$

$$= Nk \ln \left(\frac{4\pi r^3 N \Theta^{3/2} e^{3/2} \sqrt{2\pi}}{4\pi a_0^3 N} \right) = Nk \ln \left(\frac{3e^{3/2} \Theta^{3/2} V}{2\sqrt{2\pi} a_0^3 N} \right).$$

Таким образом, при условии $\frac{1}{x\Theta} \ll 1$ энтропия выражается следующим образом:

$$S = Nk \ln \left(\frac{3e^{3/2} \Theta^{3/2} V}{2\sqrt{2\pi} a_0^3 N} \right),$$

где $e = 2,718$ – основание натуральных логарифмов. Это выражение такое же, как для энтропии идеального газа.

При низких температурах возможна такая ситуация, что будет заселено только основное состояние, а вероятность возбуждения будет малой. В этом случае для свободной энергии получаем выражение:

$$F = -NT \ln \left(\exp \left(-\frac{E_1}{T} \right) \right) = NE_1,$$

которое не зависит от температуры, и, следовательно, $S = 0$. В разреженном газе E_1 не зависит также от объема и электроны не дают вклада в давление. В плотном веществе $P_1 = -N \frac{\partial E_1}{\partial V}$ определяет упругую составляющую давления при нулевой температуре согласно уравнению (6).

3.6. Расчет ионизации

Данный метод расчета характеристик плазмы позволяет с иных позиций подойти к вопросу ионизации. В данном методе все энергетические состояния атома в плазме (и с отрицательной, и с положительной энергией) являются дискретными. Состояния электронов с отрицательной энергией – это связанные состояния, и требуется затрата энергии $-E_n$, чтобы оторвать электроны от ядра. Электроны с положительной энергией под действием внешней силы, очевидно, могут перемещаться из ячейки в соседнюю ячейку при сохранении в среднем электрической нейтральности плазмы. При рассмотрении электропроводности такие электроны можно считать свободными. Тогда степень ионизации плазмы можно определить соотношением:

$$\alpha = \frac{1}{Z} \sum_{n=n^*}^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right),$$

где $n^* = \sqrt{2x}$ отвечает условию $E_n = 0$. В отличие от теории ионизационного равновесия в данном случае все атомы рассматриваются как частицы одного сорта, которые в условиях термодинамического равновесия могут находиться в различных возбужденных состояниях. Численный расчет на основе выражения (12) показывает, что зависимость $\alpha(\rho)$ имеет скачки в точках, соответствующих $x = n^2/2$, когда за счет сжатия в область $E_n > 0$ переходят состояния с данным значением n . Отметим, что другие величины (давление, энтропия)

при этом сохраняют непрерывность. В табл. 1 приведены значения главного квантового числа n в точках скачка и соответствующие этим скачкам значения плотности ρ и концентрации частиц N . В скобках у числа указана степень десяти.

Эти скачки в степени ионизации являются отражением явления, аналогичного переходу Мотта [30], когда электроны из основного состояния при сжатии переходят в состояние с энергией больше нуля. В данном случае $E_n > 0$ достигается для возбужденных состояний, которые заселяются в условиях термодинамического равновесия. При ионизации основного состояния при сжатии получается $\alpha = 1$. Ионизация возбужденных состояний не дает значение $\alpha = 1$, величина скачка зависит от температуры и тем больше, чем меньше n .

На рис. 10 показана зависимость степени ионизации от плотности при различных значениях температуры. На этом рисунке видны скачки в α , соответствующие ионизации возбужденных состояний при сжатии. При различных температурах скачки α происходят при одних и тех же плотностях. Гладкие кривые отвечают расчету по уравнению Саха. Такого же рода скачки в степени ионизации можно получить в расчетах плазмы щелочных металлов и плазме других элементов.

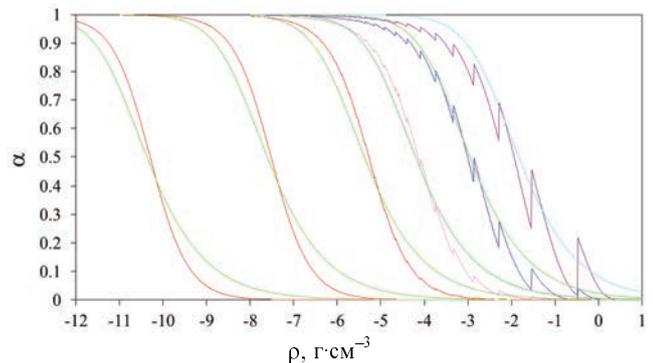


Рис. 10. Зависимость доли свободных электронов от плотности при значениях температуры 0,7, 1, 2, 3, 4, 5 эВ

Таблица 1

Значения плотности ρ и концентрации частиц N атомов водорода в точках, в которых степень ионизации претерпевает скачок

n	2	3	4	5	6	7	8
$\rho, \text{Г}\cdot\text{см}^{-3}$	0,336	0,0295	5,24(-3)	1,37(-3)	4,6(-4)	1,8(-4)	8,2(-5)
$N, 1/\text{см}^3$	2,0(23)	1,8(22)	3,1(21)	8,2(20)	2,75(20)	1,1(20)	4,9(19)

На рис. 11 показана зависимость степени ионизации от температуры при различных значениях плотности. Число свободных электронов при одинаковой температуре уменьшается с увеличением плотности. Для получения α , близкого к единице, с увеличением плотности требуются все большие и большие температуры. Малое число свободных электронов (например, $\alpha = 0,1$) при высоких плотностях достигается также при более высоких температурах.

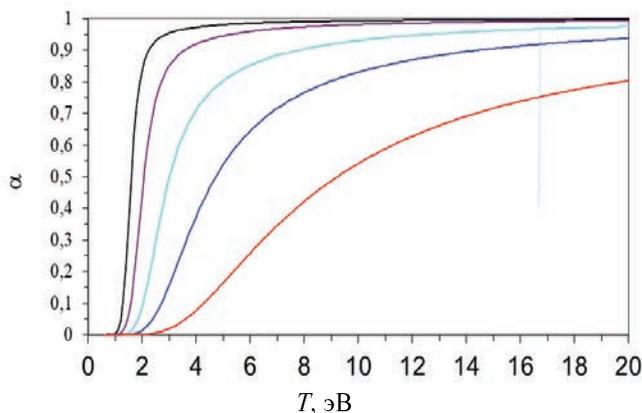


Рис. 11. Зависимость доли свободных электронов от температуры при значениях плотности 10^{-6} , 10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-2} , 10^{-1} г/см³

3.7. Распределение электронов по кинетической энергии

Исходя из СС, можно определить распределение электронов по кинетической энергии. Вероятность электрону иметь кинетическую энергию $n^2/2x^2$ равна:

$$\varphi_n = 2n^2 \exp\left(-\left(\frac{n^2}{2x^2} - 1/x\right)/\Theta\right)/Z.$$

Определим плотность вероятности $f_n = \varphi_n \Theta / \Delta E_n$ в виде отношения φ_n к безразмерному интервалу изменения кинетической энергии $\Delta E_n = n/x^2$ при изменении n на единицу. При большом числе уровней, когда $n \gg \Delta n = 1$ дискретное распределение (гистограмма) заменяется на непрерывное $f(n) = \varphi(n)x^2\Theta/n$. В этом случае статистическая сумма равна выражению (4) и функция распределения равна:

$$f(n) = \frac{n\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}x\sqrt{\Theta}} \exp\left(-\frac{n^2}{2x^2\Theta}\right).$$

Если ввести для безразмерной кинетической энергии обозначение $\xi = \frac{n^2}{2x^2T}$, то получаем вы-

ражение $f(\xi) = \frac{2\sqrt{\xi}}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi}$, которое совпадает с рас-

пределением Максвелла для идеального газа. Такое распределение реализуется в плазме при температуре $1/x \ll T$.

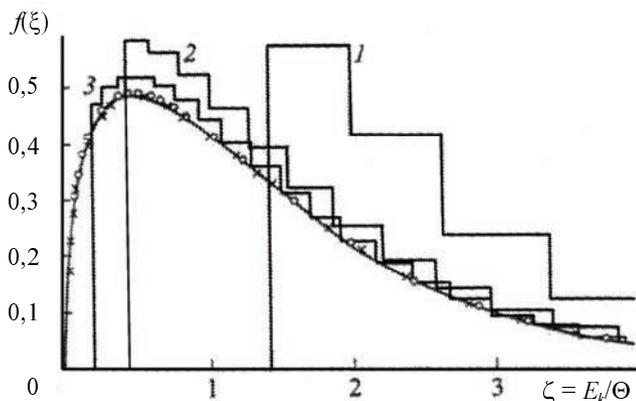


Рис. 12. Функция распределения электронов водородной плазмы по кинетической энергии: $\rho = 10^{-3}$ г/см³. Гладкая кривая – распределения Максвелла. $T = 16$ (1), 5 (2), 10 эВ (3). Точки: $\circ - T = 30$ эВ, $\times - T = 100$ эВ

На рис. 12 представлены результаты численных расчетов функции распределения $f(\xi)$ для плазмы с плотностью 10^{-3} г·см⁻³ при различных температурах (1,6; 5; 10; 30; 100 эВ). Сплошной гладкой кривой показано распределение Максвелла. Гистограммы 1, 2, 3 соответствуют температурам плазмы 1,6; 5; 10 эВ, для которых параметры неидеальности равны соответственно 1,2; 0,4; 0,2. Во всех трех случаях имеется заметное отклонение от распределения Максвелла тем большее, чем больше параметр неидеальности. Анализ рис. 12 показывает, что функция распределения электронов по кинетической энергии может служить для количественной оценки степени неидеальности плазмы.

3.8. Уравнение состояния холодного водорода (дейтерия)

При низких температурах возможна такая ситуация, что будет заселено только основное состояние атома, а вероятность возбуждения будет малой.

В таком плотном веществе $P_x = -\left(\frac{\partial NE_1}{\partial V}\right)_{T=0} = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{T=0}$ определяет упругую составляющую давления при нулевой температуре.

При нагреве плотного вещества тепловая энергия является энергией колебаний атомов (ядер) относительно положения равновесия. При высоких амплитудах колебаний согласно молекулярно-кинетической теории энергия колебаний, приходящаяся на одну частицу, равна $E_T = 3kT$, где k – постоянная Больцмана, T – температура. Удельная энергия (на один грамм вещества) равна $E_T = \frac{3kTN_A}{A} = \frac{3RT}{A}$, где A – атомная масса, $R = kN_A$ – газовая постоянная. В соответствии с теорией Ми-Грюнайзена отношение $\Gamma = \frac{P_T}{\rho E_T}$

является постоянным, не зависящим от температуры. При отверждении при низкой температуре (11 К) водород образует молекулярные кристаллы, в узлах решетки которых расположены двухатомные молекулы H_2 . Уравнение состояния водорода при низких температурах уже в течение почти столетия привлекает интерес исследователей. В 1935 году Е. Вигнер и Х.Б. Хантингтон [31] предсказали возможность перехода молекулярного водорода в атомарную фазу по их расчетам при 25 ГПа. В последующие годы было выполнено большое число как экспериментальных, так и теоретических [32–45] работ. Однако четкого доказательства превращения водорода в атомарную фазу до сих пор нет [45–48].

Нулевая изотерма (холодная кривая) молекулярного водорода в настоящее время может быть построена на основании экспериментальных данных по статическому сжатию до давления 254 ГПа [32–38]. При температуре 4 К в работе [32] определена плотность водорода до давления 2 ГПа. Данные [33] до 2,5 ГПа подтверждают эти результаты. Методом алмазных наковален экспериментальные данные были получены сначала до давлений 27–30 ГПа [34–36], затем в работе [8] до 110 ГПа. В дальнейшем в работе [37] кривая сжимаемости водорода была определена до 180 ГПа и недавно [38] до 254 ГПа. Эти данные позволяют получить энергию молекулярной фазы прямо из эксперимента. Экспериментальные точки на изотермах для молекулярного водорода приведены на рис. 13.

Наше расчетное описание представлено тремя кривыми с различными параметрами уравнения состояния (6). Такое описание эксперимента показывает резкое изменение наклона кривых $P(\rho)$ при давлениях 2,5 и 100 ГПа, что можно объяснить изменением электронной структуры молекулярного водорода при сжатии. В работе [44] отмечается, что при давлении 5–150 ГПа водород имеет кристаллическую гпу структуру, в узлах решетки которой расположены свободно вращающиеся молекулы водорода. При давлении выше 150 ГПа обнаружена ориентационная упорядоченность молекул водорода при сохранении гпу структуры. Как видно из рис. 13, $P(\rho)$ при давлении выше 150 ГПа монотонно зависит от плотности и хорошо описывается уравнением состояния (6) с параметрами $B_0 = 62$ ГПа и $\rho_0 = 0,39$ г·см⁻³. Это означает, что ориентация молекул мало влияет на зависимость $P(\rho)$.

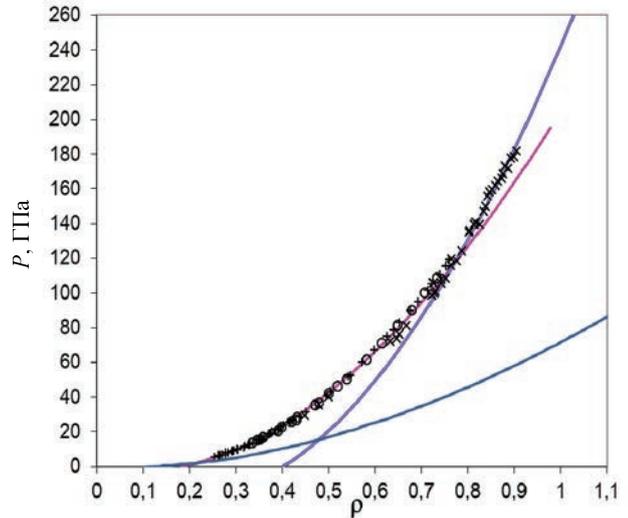


Рис. 13. Упругое давление в молекулярном водороде в зависимости от плотности. Экспериментальные точки из [32–38]

Рост изотерм $P(\rho)/\rho$ в зависимости от плотности при высоких плотностях связан с вкладом упругого (холодного) давления. Упругое давление экспериментально измерено до 250 ГПа [32–38]. Предполагается, что это — давление в разных фазах молекулярного водорода. Несмотря на многочисленные попытки, экспериментально переход в атомарную фазу до сих пор не определен и отсутствуют данные измерений ее уравнения состояния.

В табл. 2 приведены параметры уравнения состояния в форме (6) атомарной фазы водорода, которые интерполируют результаты различных теоретических моделей, и параметры молекулярной фазы, которые хорошо описывают экспериментальные данные.

Отличие экстраполированных в область высоких давлений теоретических результатов [41] для водорода от экстраполированных экспериментальных данных для молекулярной фазы [37] находится в пределах от – 6 % при $3 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ до 4 % при $400 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. Отличие данных А. И. Абрикосова [39] и Ю. Кагана [42] составляет –9,5 и 7 % и 0 и 17 % при $3 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ и $400 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ соответственно.

Таблица 2

Параметры уравнения состояния Li, Na и водорода

Элемент	$\rho_n, \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$	$B_n, \text{ ГПа}$	$E_n, \text{ ГПа}$
Li	0,548	13,7	8,07
Li	0,415	6,5	3,84
Na	1,00	7,8	8,4
Na	1,18	15,7	14,3
H ₂ (мол.)	0,112	1,2	1
H ₂ (мол.)	0,19	9,7	4,75
H ₂ (мол.)	0,39	62	14,8
H (ат.) [31]	0,59	185	14,6
H (ат.) [39]	0,586	145	11,5
H (ат.) [41]	0,54	112	9,7
H (ат.) [42]	0,612	143	10,9

В этих условиях с учетом близости экстраполированной нулевой экспериментальной изотермы к ряду теоретических изотерм атомарной фазы (см. табл. 2) в расчетах широкодиапазонного уравнения состояния взята экспериментальная изотерма молекулярной фазы. Использование чисто кулоновского потенциала дает рост давления при плотности водорода $2,7 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. В молекулярной фазе этот рост начинается при плотности гораздо меньшей.

Некоторое уточнение уравнения состояния атомарной фазы возможно путем сравнения с экспериментальными данными по ICF. Однако важно отметить, что экспериментальные результаты (выход нейтронов, максимальная плотность) зависят, помимо уравнения состояния, от целого ряда параметров, таких как степень симметрии сжатия, перемешивания и других, которые, как правило, не могут быть измерены.

3.9. Широкодиапазонное уравнение состояния водорода (дейтерия). Сравнение с данными FPEOS и DFT

С помощью нашего метода было разработано широкодиапазонное уравнение состояния водорода и дейтерия, которое может применяться для решения задач инерциального термоядерного синтеза (ICF) и астрофизических проблем в областях плотностей водорода до $800 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ и температур до 6 кэВ.

На рис. 14 показаны графики функций $P(\rho)/\rho$ при разных значениях температуры. Сплошными кривыми показаны результаты расчетов представленным здесь методом, которые сравниваются с опубликованными результатами исследований, выполненных по разным методам. В работе [49] с использованием моделирования методом Монте-Карло интегралов по траекториям (PIMC) было получено уравнение состояния из первых принципов (FPEOS), которое можно применять при исследованиях ICF. В работе [50] было представлено широкодиапазонное уравнение состояния, которое построено комбинацией двух вариантов молекулярно-динамического моделирования, основанного на теории функционала плотности FPMD и OFMD.

При не слишком высокой плотности и высокой температуре уравнение состояния водорода близко к уравнению состояния идеального газа, имеющего одну (нейтральный атом) или две (протон и электрон) независимо движущиеся частицы на атом водорода. Нелинейная зависимость давления от плотности атомарного водорода в этом случае связана электронными возбуждениями в процессе перехода от идеального газа с двумя и одной частицей на атом водорода. Когда тепловое давление равно или ниже упругого (холодного) давления, увеличение функции $P(\rho)/\rho$ в нашем расчете связано с вкладом упругого давления. Из-за слишком большого времени расчетов методом Монте-Карло при высокой плотности методом FPEOS [49] получено всего по 5 точек на изотерму. Время расчета одной изотермы (1000 точек) нашим методом занимает на персональном компьютере меньше 1 минуты.

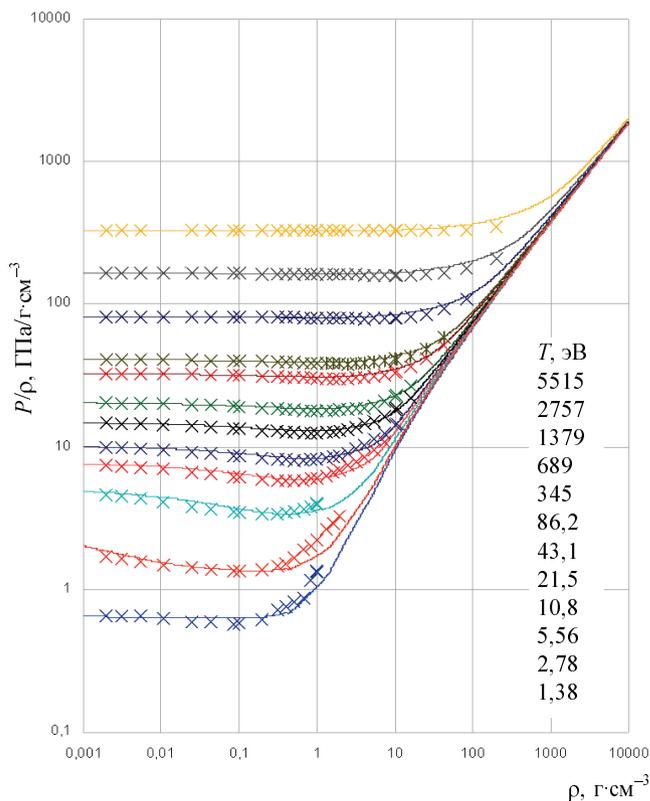


Рис. 14. Графики функций $P(\rho)/\rho$ при разных значениях температуры. Сплошными кривыми показаны результаты расчетов представленным здесь методом. Маркерами показаны результаты работы [49] методом PIMC и результаты двух вариантов молекулярно-динамического моделирования, основанного на теории функционала плотности, FPMD и OFMD

Выводы

В работе представлен универсальный метод расчета свойств водорода с учетом неидеальности, обусловленной сжатием и нагревом. Универсальность, принципиальное отличие представленного метода от существующих и его очевидные конкурентные преимущества связаны с тем, что расчеты выполняются на основе сходящейся статистической суммы, выраженной в аналитической форме, что позволяет учесть влияние сжатия и нагрева на термодинамические свойства водородной плазмы в широких, практически неограниченных, диапазонах плотностей и температур. Необходимо подчеркнуть, что вычислительные ресурсы являются главным ограничением при использовании существующих расчетных методов, таких как PIMC и DFT, которые вследствие этого позволяют получать ограниченное количество расчетных данных в ограниченном диапазоне температур и плотностей. Вычислительные затраты при использовании

нашего метода настолько ничтожны, что позволяют получить множество (сотни, тысячи, десятки тысяч) наборов термодинамических свойств в широких диапазонах температуры и плотности в течение всего нескольких минут расчетов на самом обычном персональном компьютере. Уравнение для статистической суммы, которая, как показано, является сходящейся при любых значениях плотности и температуры, получено из решения уравнения Шредингера с граничными условиями смешанного типа на границе ячейки Вигнера–Зейца, содержащей один атом водорода, размер которой изменяется при сжатии, меняя вследствие этого уровни энергии в атоме водорода. Показано, что классическая проблема физики плазмы – расходимость статистической суммы водородной плазмы – связана с недопустимо грубой аппроксимацией уровней энергии сжатого атома водорода уровнями свободного, находящегося в бесконечном объеме атома, и что при учете конечного объема, приходящегося на один атом, она становится сходящейся.

Показано, что в области теплой плотной материи (WDM), близкой к первой ионизации, происходит переход от сжатия идеального газа нейтральных атомов к сжатию идеального газа с удвоенным количеством частиц (ядер и электронов) после полной ионизации атомов. Метод демонстрирует описание теплоемкости, связанной с возбуждением состояний и числа свободных (с энергией, большей нуля) электронов.

Применимость метода показана на примере расчета давления в парах металлов. При высоких возбуждениях (больших значениях главного квантового числа n) уровни энергии всех элементов совпадают с уровнями энергии атома водорода.

Сравнение результатов расчетов уравнения состояния (12) для паров металлов со значением ρ/A в интервале $0,0017 - 0,011 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ показывает, что результаты близки к экспериментальным данным [6]. Преимуществом нашего метода является его ясность и чрезвычайная дешевизна и доступность расчетов. Расчет при постоянной плотности 1000 точек по температуре занимает минуты персонального компьютера. В [6] приведены отдельные точки (числом от 6 до 9), рассчитанные в рамках квантовой молекулярной динамики (QMD). Они выше данных эксперимента [6] и результатов наших расчетов, как правило, на 10–20 %. При сравнении следует учитывать, что ошибки эксперимента не менее 15 %, как и ошибки QMD. Точки QMD рассчитаны в [6] в узком интервале тем-

ператур (до 30–40 кК). Экспериментальные точки [6] находятся в еще более узкой области (13–30 кК). В этой области точки описываются либо уравнением состояния идеального газа слабо возбужденных нейтральных атомов, либо они расположены на начальном нелинейном участке перехода к высоким возбуждениям или к ионизации атома. В пределе больших возбуждений происходит переход к уравнению состояния идеального газа с удвоенным числом независимо движущихся частиц, атомного остатка (ядра) и электрона. Наши расчеты более явно фиксируют этот переход по сравнению с расчетами QMD, по-видимому, и из-за малого числа точек QMD [6].

Данный метод расчета характеристик плазмы позволяет с иных позиций подойти к вопросу ионизации. В данном методе все энергетические состояния атома в плазме (и с отрицательной и с положительной энергией) являются дискретными. Состояния электронов с отрицательной энергией – это связанные состояния, и требуется затрата энергии $-E_n$, чтобы оторвать электроны от ядра. Электроны с положительной энергией под действием внешней силы, очевидно, могут перемещаться из ячейки в соседнюю ячейку при сохранении в среднем электрической нейтральности плазмы. При рассмотрении электропроводимости такие электроны можно считать свободными.

Список литературы

1. Nuckolls, J., Wood, L., Thiessen, A., & Zimmerman, G. (1972). Laser compression of matter to super-high densities: Thermonuclear (CTR) applications. *Nature*, 239(5368), 139-142.
2. *Physics of Inertial Fusion: Beam Plasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter*, Stefano Atzeni and Jürgen Meyer-ter-Vehn, Clarendon Press, 2004, 458 pages, ISBN: 0198562640.
3. Clark, D. S., Haan, S. W., Hammel, B. A., Salmonson, J. D., Callahan, D. A., & Town, R. P. (2010). Plastic ablator ignition capsule design for the National Ignition Facility. *Physics of Plasmas*, 17(5), 052703.
4. Militzer, B., & Hubbard, W. B. (2009). Comparison of Jupiter interior models derived from first-principles simulations. *Astrophysics and Space Science*, 322(1-4), 129-133.
5. Militzer, B., & Hubbard, W. B. (2013). Ab initio equation of state for hydrogen-helium mixtures with recalibration of the giant-planet mass-radius relation. *The Astrophysical Journal*, 774(2), 148.
6. Clérouin, J., Noiret, P., Blottiau, P., Recoules, V., Siberchicot, B., Renaudin, P., ... & Starrett, C. E. (2012). A database for equations of state and resistivities measurements in the warm dense matter regime. *Physics of Plasmas*, 19(8), 082702.
7. Faussurier, G., Blancard, C., Combis, P., & Videau, L. (2014). Electrical and thermal conductivities in dense plasmas. *Physics of Plasmas*, 21(9), 092706.
8. Caillabet, L., Mazevet, S., & Loubeyre, P. (2011). Multiphase equation of state of hydrogen from ab initio calculations in the range 0.2 to 5 g/cc up to 10 eV. *Physical Review B*, 83(9), 094101.
9. Faussurier, G., Blancard, C., & Cossé, P. (2014). Coupling of an average-atom model with a collisional-radiative equilibrium model. *Physics of Plasmas*, 21(11), 112707.
10. Redmer, R. (1999). Electrical conductivity of dense metal plasmas. *Physical Review E*, 59(1), 1073.
11. Kerley, G. I. (1972) Equation of State and Phase Diagram of Dense Hydrogen, *Phys. Earth Planet. Inter.* 6, 78.
12. G. I. Kerley, Sandia National Laboratory, Technical Report No. SAND2003-3613, 2003 (unpublished).
13. Harbour, L., Dharma-Wardana, M. W. C., Klug, D. D., & Lewis, L. J. (2017). Equation of state, phonons, and lattice stability of ultrafast warm dense matter. *Physical Review E*, 95(4), 043201.
14. Nadykto, B. A. (1997). On statistic sum and equation of state of hydrogen plasma. In *DOKLADY AKADEMII NAUK* (Vol. 355, No. 6, pp. 754-757).
15. Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. (2013). *Statistical Physics: Volume 5* (Vol. 5). Elsevier.
16. M. Planck, Zur Quantenstatistik des Bohrschen Atommodells, *Ann. Phys.* (4) 75, 673–684 (1924).
17. Brillouin, L. (1930). *Les statistiques quantiques*. Presses universitaires, Paris.
18. A. I. Larkin (1960). Thermodynamic functions of a low-temperature plasma, *Soviet Physics JETP* 11 (6), 1363
19. Zeldovich, I. B., & Raizer, I. P. (1968). *Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena* (Vol. 2). Academic Press.
20. Ebeling, W., & Kremp, D. (1976). *Theory of bound states and ionization equilibrium in plasmas and solids* (Vol. 5). Akademie-Verlag.
21. Б. А. Надыкто - ДАН, Т 316, № 6, с. 1389 (1991).
22. Nadykto, B. A. (1993). A semiempirical model for calculation of the energies of states of multielectron ions. *Physica-Uspekhi*, 36(9), 794.

23. Надыкто, Б. А. (2005). Влияние высокого статического давления на кристаллическую и электронную структуру переходных металлов, лантаноидов и актиноидов. *Материаловедение*, (5), 2-6.
24. Надыкто, Б. А. (1994). О приближенных радиальных волновых функциях для многоэлектронных ионов, *Вопр. атомной науки и техники. Сер. теор. и прикл. физика*, 1.
25. Надыкто, Б. А. Электронные фазы твердых тел. 2001. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева)*, 2001, т. XLV, № 5-6, 7-15
26. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, 9th ed., edited by M. Abramowitz and I. A. Stegun (Dover, New York, 1972)
27. Ch. E. Moore *ATOMIC ENERGY LEVELS*. 34, 16, 1949.
28. Bashkin S., J.O. Stoner *ATOMIC ENERGY LEVEL and GROTRIAN DIAGRAMS*. New York, NHPC, 1975.
29. Faussurier, G., & Blancard, C. (2019). Pressure in warm and hot dense matter using the average-atom model. *Physical Review E*, 99(5), 053201.
30. Mott, Nevill Francis. "Metal-insulator transitions." (1974).
31. Wigner, E., & Huntington, H. Á. (1935). On the possibility of a metallic modification of hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 3(12), 764-770.
32. Steward, J.W. (1956) *J. Phys. Chem. Solids*, 1, 146 [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(56\)90022-1](https://doi.org/10.1016/0022-3697(56)90022-1).
33. Anderson, M. S., & Swenson, C. A. (1974). Experimental compressions for normal hydrogen and normal deuterium to 25 kbar at 4.2 K. *Physical Review B*, 10(12), 5184.
34. van Straaten, J., & Silvera, I. F. (1988). Equation of state of solid molecular H₂ and D₂ at 5 K. *Physical Review B*, 37(4), 1989.
35. Zha, C. S., Duffy, T. S., Mao, H. K., & Hemley, R. J. (1993). Elasticity of hydrogen to 24 GPa from single-crystal Brillouin scattering and synchrotron x-ray diffraction. *Physical Review B*, 48(13), 9246.
36. Loubeyre, P., LeToullec, R., Hausermann, D., Hanfland, M., Hemley, R. J., Mao, H. K., & Finger, L. W. (1996). X-ray diffraction and equation of state of hydrogen at megabar pressures. *Nature*, 383(6602), 702-704.
37. Akahama, Y., Nishimura, M., Kawamura, H., Hirao, N., Ohishi, Y., & Takemura, K. (2010). Evidence from x-ray diffraction of orientational ordering in phase III of solid hydrogen at pressures up to 183 GPa. *Physical Review B*, 82(6), 060101.
38. Ji, C., Li, B., Liu, W., Smith, J. S., Majumdar, A., Luo, W., ... & Meng, Y. (2019). Ultrahigh-pressure isostructural electronic transitions in hydrogen. *Nature*, 573(7775), 558-562.
39. Abrikosov, A. A. (1954). *Astron. Zh.* XXXI, 112.
40. Neece, G. A., Rogers, F. J., & Hoover, W. G. (1971). Thermodynamic properties of compressed solid hydrogen. *Journal of Computational Physics*, 7(3), 621-636.
41. Ross, M. (1974). A theoretical analysis of the shock compression experiments of the liquid hydrogen isotopes and a prediction of their metallic transition. *The Journal of Chemical Physics*, 60(9), 3634-3644.
42. Kagan, I., Pushkarev, V. V., & Kholas, A. (1977). Equation of state for the metallic phase of hydrogen. *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*, 73, 967-987..
43. Mao, H. K., Chen, X. J., Ding, Y., Li, B., & Wang, L. (2018). Solids, liquids, and gases under high pressure. *Reviews of Modern Physics*, 90(1), 015007.
44. Loubeyre, P., Occelli, F., & Dumas, P. (2020). Synchrotron infrared spectroscopic evidence of the probable transition to metal hydrogen. *Nature*, 577(7792), 631-635.
45. Ji, C., Li, B., Liu, W., Smith, J. S., Björling, A., Majumdar, A., ... & Sinogeikin, S. (2020). Crystallography of low Z material at ultrahigh pressure: Case study on solid hydrogen. *Matter and Radiation at Extremes*, 5(3), 038401.
46. Silvera, I. F., & Dias, R. (2018). Metallic hydrogen. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 30(25), 254003.
47. Silvera, I. F., & Dias, R. (2019). Comment on: Observation of a first order phase transition to metal hydrogen near 425 GPa. *arXiv preprint arXiv:1907.03198*.
48. Desjarlais, M. P., Knudson, M. D., & Redmer, R. (2019). Comment on "Insulator-metal transition in dense fluid deuterium". *Science*, 363(6433).
49. Hu, S. X., Militzer, B., Goncharov, V. N., & Skupsky, S. (2011). First-principles equation-of-state table of deuterium for inertial confinement fusion applications. *Physical Review B*, 84(22), 224109.
50. Wang, C., & Zhang, P. (2013). Wide range equation of state for fluid hydrogen from density functional theory. *Physics of Plasmas*, 20(9), 092703.
51. Mihaylov DI, Karasiev VV, Hu SX, Rygg JR, Goncharov VN, Collins GW. Improved first-principles equation-of-state table of deuterium for high-energy-density applications. *Physical Review B*. 2021 Oct 12;104(14):144104.
52. He Z, Zhang Q, Liu H, Jia G, Huang X, Fang Z, Xie Z, Ye J, Shu H, Dong J, Zhang F. High-

precision equation of state benchmark for cryogenic liquid deuterium at ultrahigh pressure. Physical Review B. 2021 Apr 12;103(13):134107.

53. W. B. Hubbard and B. Militzer, A preliminary Jupiter model, Astrophys. J. 820, 80 (2016).

54. Fratanduono DE, Millot M, Fernandez Pañella A, Sterne PA, Collins GW, Hicks DG, Eggert JH, Boehly TR, Celliers PM. Measurement of the

sound speed in dense fluid deuterium along the cryogenic liquid Hugoniot. Physics of Plasmas. 2019 Jan 23;26(1):012710.

55. Abramowitz, M., & Stegun, I. A. (Eds.). (1964). Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables (Vol. 55). US Government printing office.

Приложение

Электронная статистическая сумма равна:

$$Z = \sum_1^{\sqrt{x}} 2n^2 \exp\left(\frac{1}{2n^2\Theta}\right) + \sum_{\sqrt{x+1}}^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}\right)\right). \quad (\text{П1})$$

Свободная энергия равна $F = -N\Theta \ln Z$. Давление, связанное с возбуждением электронов, равно:

$$\begin{aligned} P &= -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{N\Theta}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial V}\right)_T = \frac{N\Theta a_0^3}{4\pi r^2 N Z a_0^3} \left(\frac{\partial Z}{\partial r}\right)_T = \frac{N\Theta}{4\pi x^2 N Z a_0^3} \left(\frac{\partial Z}{\partial x}\right)_T = \\ &= \frac{N\Theta}{4\pi x^2 N Z a_0^3} \sum_{\sqrt{x+1}}^{\infty} \frac{2n^2}{\Theta} \left(\frac{n^2}{x^3} - \frac{1}{x^2}\right) \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}\right)\right) = \frac{N\Theta}{3VZ} \sum_{\sqrt{x+1}}^{\infty} \frac{2n^2}{\Theta} \left(\frac{n^2}{x^2} - \frac{1}{x}\right) \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}\right)\right). \end{aligned}$$

В случае, когда заселенность нижних связанных состояний мала, а полное число уровней энергии велико, суммирование в (П1) можно заменить интегрированием. В результате получаем:

$$Z = \int_0^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right) dn = \int_0^{\infty} n \exp\left(-\frac{n^2}{2x^2\Theta}\right) \exp\left(\frac{1}{x\Theta}\right) dn^2. \quad (\text{П2})$$

Введя новую переменную $t = \frac{n^2}{2x^2\Theta}$, получим:

$$Z = \int_0^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right) dn = (2x^2\Theta)^{3/2} \exp\left(\frac{1}{x\Theta}\right) \int_0^{\infty} \sqrt{t} e^{-t} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (2x^2\Theta)^{3/2} \exp\left(\frac{1}{x\Theta}\right).$$

В этом пределе $\ln Z = \frac{1}{2} \ln \pi + \frac{1}{2} \ln 2 + 3 \ln x + \frac{3}{2} \ln \Theta + \frac{1}{x\Theta}$.

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = N\Theta \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = N\Theta \frac{\partial \ln Z}{4\pi r^2 \partial r} = \frac{N\Theta}{4\pi x^2 a_0^3} \frac{\partial (3 \ln x + 1/x\Theta)}{\partial x} = \frac{N\Theta}{4\pi x^2 a_0^3} \left(\frac{3}{x} - \frac{1}{x^2\Theta}\right) = \frac{N\Theta}{V} \left(1 - \frac{1}{3x\Theta}\right).$$

Для электронной теплоемкости получается выражение:

$$c_v = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}\right)_V = k \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{\Theta^2},$$

где $\langle E \rangle$ – среднее значение энергии электрона в условиях термодинамического равновесия, $\langle E^2 \rangle$ – среднее значение квадрата энергии электрона. Приводим вывод.

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_1^{\infty} 2n^2 E_n \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right) \\ c_v &= \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{Z} \sum_1^{\infty} 2n^2 E_n \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right) \left(\frac{E_n}{\Theta^2} k\right) - \frac{1}{Z^2} \sum_1^{\infty} 2n^2 E_n \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right) \frac{\partial Z}{\partial \Theta} k = \\ &= \frac{k}{\Theta^2} \frac{1}{Z} \sum_1^{\infty} 2n^2 E_n^2 \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right) - \frac{1}{Z^2} \sum_1^{\infty} 2n^2 E_n \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right) \sum_1^{\infty} 2n^2 \exp\left(-\frac{E_n}{\Theta}\right) \frac{E_n}{\Theta^2} k = k \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{\Theta^2}.\end{aligned}$$

В случае, когда заселенность нижних связанных состояний мала, а полное число уровней энергии велико, средняя внутренняя энергия равна:

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \frac{3}{2} \Theta - \frac{1}{x} \\ \langle E \rangle &= \frac{1}{Z} \int_0^{\infty} \left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}\right) 2n^2 \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right) dn = \frac{1}{Z} \left(I \exp\left(\frac{1}{x\Theta}\right) - \frac{Z}{x}\right). \\ I &= \int_0^{\infty} \frac{n^2}{2x^2} 2n^2 \exp\left(-\frac{n^2}{2x^2\Theta}\right) dn.\end{aligned}$$

Вводя новую переменную $t = \frac{n^2}{2x^2\Theta}$, имеем $n^2 = 2x^2\Theta t$, и для I получаем значение:

$$\begin{aligned}I &= \Theta \int_0^{\infty} \frac{n^2}{2x^2\Theta} n \exp\left(-\frac{n^2}{2x^2\Theta}\right) dn^2 = \Theta (2x^2\Theta)^{3/2} \int_0^{\infty} t^{3/2} \exp(-t) dt \\ &= \int_0^{\infty} t^{3/2} \exp(-t) dt = -t^{3/2} \exp(-t) \Big|_0^{\infty} + \frac{3}{2} \int_0^{\infty} t^{1/2} \exp(-t) dt.\end{aligned}$$

Первый член равен нулю. Интеграл во втором члене согласно [55] равен $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

В результате, учитывая выражение (П2) для СС Z , получаем среднюю внутреннюю энергию:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \left(I \exp(1/x\Theta) - \frac{Z}{x}\right) = \left(\frac{2\Theta (2x^2\Theta)^{3/2} 3\sqrt{\pi} \exp(1/x\Theta)}{\sqrt{\pi} (2x^2\Theta)^{3/2} 4 \exp(1/x\Theta)} - \frac{1}{x}\right) = \frac{3}{2} \Theta - \frac{1}{x}.$$

Следовательно,

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} \Theta - \frac{1}{x}.$$

Для производной давления по температуре при постоянном давлении получаем:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V &= \frac{Nk}{V} + \frac{N}{3VZ} \sum_{x+1}^{\infty} 2n^2 \left(\frac{n^2}{x^2} - \frac{1}{x}\right) \left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}\right) \frac{k}{\Theta^2} \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right) - \\ &- \frac{N}{3VZ^2} \sum_{x+1}^{\infty} 2n^2 \left(\frac{n^2}{x^2} - \frac{1}{x}\right) \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right) \sum_{x+1}^{\infty} 2n^2 \left(\frac{n^2}{x^2} - \frac{1}{x}\right) \left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}\right) \frac{k}{\Theta^2} \exp\left(-\frac{n^2/2x^2 - 1/x}{\Theta}\right).\end{aligned}$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СЖАТЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ И НОВЫЕ ШКАЛЫ ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ СНИЖЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ПРИ КАЛИБРОВКЕ ДАВЛЕНИЯ

Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто

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

Показано, что безразмерное уравнение состояния (УРС) для холодного давления $P/3B_0 = (\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3})$, где B – модуль объемного сжатия, ρ – плотность, $\sigma = \rho/\rho_0$ – степень сжатия, а индекс 0 относится к свойствам материала при нулевых температуре $T = 0$ К и давлении $P = 0$ ГПа, является универсальным и адекватно описывает сжатие металлов, диэлектриков и соединений. Предложено и оценено по экспериментальным данным новое холодное УРС для алмаза с $\rho_0 = 3,515$ г·см⁻³ и $B_0 = 442$ ГПа. Тщательная оценка нового уравнения состояния показывает, что оно хорошо согласуется с экспериментами по статическому и ударному сжатию при давлениях до 1400 ГПа. Таким образом, оно может использоваться в качестве новой алмазной шкалы давления, где плотность алмаза и исследуемого материала измеряется с помощью рентгеновской дифракции, а $P(\rho)$ выражается через EOS алмаза. Разработана новая рубиновая шкала давления

$$P = \frac{1904}{7,2} \left(\left(1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^{7,2} - 1 \right), \text{ где } \lambda_0 = 694,24 \text{ – длина волны линии флуоресценции рубина}$$

$R1$, а $\Delta\lambda = \Delta\lambda(\rho)$ – сдвиг линии при сжатии.

Ключевые слова: алмазные наковальни, шкала давления, универсальное уравнение состояния, изотермы, изобары, ударная адиабата.

Введение

В течение десятилетий измерения в алмазных наковальнях являются важным источником информации о свойствах материалов при высоких давлениях и температурах. В то время как плотность образца может быть измерена непосредственно методом рентгеновской дифракции с высокой точностью, одновременные прямые измерения плотности и давления невозможны, и на сегодняшний день все еще существуют большие расхождения в $P(\rho)$, связанные с использованием разных шкал давления, дающие разные давления при одинаковых экспериментальных условиях [1–10].

В 1972 в [1] была предложена рубиновая шкала давления, в которой давление связано с изме-

ряемым в эксперименте сдвигом $R1$ линии флуоресценции рубина уравнением:

$$P = \frac{A}{B} \left(\left(1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^B - 1 \right),$$

где A и B – постоянные.

В работах Мао с соавторами [2–3] было получено $A = 1904$ ГПа, $B = 7,665$ по измерениям линии флуоресценции рубина $R1$ при давлениях до 80 ГПа. Ряд шкал давления [4–10] был предложен с тех пор, как работа Мао [3] увидела свет. При более высоких давлениях 100–300 ГПа эти шкалы основаны на холодном давлении, полученном из ударно-волновых измерений. При равных плотностях давление по новым шкалам систематически выше,

чем по шкале [3]. Однако превышение само по себе не обязательно является признаком совершенства, потому что холодное давление, полученное из ударно-волновых экспериментов, может содержать систематические ошибки, связанные с выбором зависимости коэффициентов Грюнайзена от плотности и неучтенными воздействиями прочности материала на ударно-волновые измерения.

Получение холодного уравнения состояния из ударных адиабат могут затруднять фазовые переходы за фронтом ударной волны, в том числе электронные фазовые переходы. Понятие электронных фаз твердых тел появилось в конце 1940-х годов, когда измерение рентгеновской дифракции в образцах под давлением показали [11], что различные фазы церия, отличаясь по плотности на 16 %, имеют одинаковый тип кристаллической решетки. Э. Ферми объяснил такое отличие тем, что различные характеристики фаз возникают из-за различной электронной структуры атомов в этих фазах [12]. Электронные фазы имеют большое значение для понимания поведения твердых тел под давлением, включая ударное воздействие.

Мы показываем, что способность сохранять электронную структуру так же важна, как и сохранение кристаллической структуры, и демонстрируем, что, поскольку различные металлы и соединения, используемые в настоящее время в качестве стандартов давления, испытывают многочисленные вызванные давлением электронные фазовые переходы, прежде чем давление достигнет нескольких мегабар. Они должны быть заменены лучшими кандидатами, которые сохраняют как кристаллические, так и электронные структуры в многомегабарном диапазоне давлений.

В работе [8] рассматривается возможность получения теплового давления за фронтом ударной волны из первых принципов вычислений. Комнатную изотерму получают, вычитая это тепловое давление из давления, получаемого в ударно-волновых экспериментах. Как следует из [13] расчеты методом функционала плотности не обладают точностью, необходимой для калибровки давления, и дают различие в давлении при использовании разных приближений до полутора раз.

В работах [14–19] указывается на необходимость учета прочности материала при получении комнатной изотермы. В работах [14, 15] обращается внимание на необходимость учета при расчете плоских ударных волн девиаторных напряжений, связанных с прочностью алмаза. После достижения предела текучести напряжение $P_x = P + 2Y/3$,

где Y – предел текучести. В [14] предел текучести алмаза в ударных волнах оценивается интервалом 69–96 ГПа.

В ряде работ [14, 15] показана стабильность алмаза до высоких давлений 800–1000 ГПа.

В работе [16] сделана попытка определения методом рассеяния Брюллиена зависимости упругих констант алмаза от температуры. Ввиду большого разброса экспериментальных данных авторы [16] без физического обоснования используют квадратичную по температуре интерполяцию для упругих констант. Параметры интерполяции определяются методом наименьших квадратов. Получение модуля объемного сжатия сопряжено с дополнительными трудностями. Используя крайние границы интервала для коэффициента C_2 , приведенные в таблице II из [56], можно получить в два раза отличающиеся значение C_2 и даже положительное C_2 (т. е. рост объемного модуля с повышением температуры). Экстраполяция $B_0(T)$ дает нулевое значение объемного модуля при $T = 6000$ К, близкой к температуре плавления алмаза. При температуре плавления становится равным нулю модуль сдвига, но не объемный модуль. Правильным является основной вывод [16], что до 1600 К уменьшение объемного модуля не очень большое, по нашим данным на 5 %.

В статье дается сравнение описания свойств алмаза с экспериментальными данными по статическому и ударно-волновому сжатию алмаза. Показано, что предложенное универсальное уравнение состояния правильно описывает весь набор экспериментальных данных по алмазу.

Универсальное уравнение состояния

Начнем с оценки двухпараметрического универсального уравнения состояния [20, 21], где упругая/холодная энергия твердого тела представляет собой сумму кинетической энергии внешних электронов в атомах и молекулах при условии квантования углового момента, и потенциальной энергии взаимодействия между электронами и ядрами. Электронные фазы различных материалов и соединений описываются одним и тем же аналитическим выражением [20, 21]. Оно содержит только два параметра, равновесную плотность ρ_{0n} и модуль объемного сжатия B_{0n} при $P = 0$ и $T = 0$, (где n – номер электронной фазы (ЭФ)), или другие два параметра, плотность ρ_{0n} и энергию E_{0n} внешних электронов в ячейке Вигнера-Зейтца, со-

держающей один атом или молекулу. Полная энергия E сжатой ячейки Вигнера-Зейтца и полное давление P в твердом теле представляют собой сумму холодных и тепловых членов:

$$\begin{aligned} E &= E_C + E_T, \\ P &= P_C + P_T. \end{aligned} \quad (1)$$

Холодная энергия E_C и холодное давление P_C для n -го номера ЭФ определяются следующими уравнениями

$$E_C(\sigma) = \frac{9B_{0n}}{\rho_{0n}} \left(\frac{\sigma^{2/3}}{2} - \sigma^{1/3} \right), \quad (3)$$

$$P_C(\sigma) = 3B_{0n} \left(\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3} \right), \quad (4)$$

где $\sigma = \rho/\rho_{0n}$ – степень сжатия.

В отличие от уравнения Бёрча-Мурнагана [25, 26], холодное уравнение состояния (4) [20–24] содержит только два параметра, ρ_{0n} и B_{0n} , и не использует $B' = \left(\frac{dB}{dP} \right)$ как параметр уравнения состояния.

В форме Ми-Грюнайзена тепловая составляющая давления задается в виде

$$P_T = \Gamma \rho E_T. \quad (5)$$

Коэффициент Грюнайзена Γ определяется в приближении Дугдейла-Макдональда [27], используя зависимости (3), (4):

$$\Gamma(\sigma) = \frac{\frac{1}{2\sigma^3} - 1}{\frac{1}{3\sigma^3} - 2}. \quad (6)$$

Зависимость температуры Дебая T_D от степени сжатия определяется из выражения

$$\Gamma(\sigma) = - \left(\frac{\partial \ln T_D}{\partial \ln V} \right)_T.$$

Интегрирование этого выражения дает:

$$T_D = T_{D0} e^{\int_1^\sigma \frac{\Gamma(t) dt}{t}}.$$

Когда $\Gamma(\sigma)$ определяется из выражения (6), получается следующее выражение для температуры Дебая

$$T_D(\sigma) = T_D(1) \left(3\sigma^{4/3} - 2\sigma \right)^{1/2}.$$

Энергию внешних электронов атомов твердого тела можно определить, когда известен модуль объемного сжатия B_0 :

$$E_n = \frac{9AB_0}{2N_A \rho_n}, \quad (7)$$

где A – атомный или молекулярный вес и N_A – число Авогадро.

Двухпараметрическое универсальное уравнение состояния с параметрами начальной фазы ρ_{0n} и B_{0n} справедливо в очень широком диапазоне давлений, включая очень высокие давления, пока сохраняется число и квантовые состояния внешних электронов. Любое изменение числа и квантовых состояний внешних электронов приводит к электронному фазовому переходу (ЭФП), который сопровождается скачком как равновесной плотности, так и объемного модуля, что хорошо видно при сравнении теории с измерениями [20–24]. Каждая электронная фаза описывается отдельным набором ρ_{0n} и B_{0n} . Зависимости объемного модуля B и $\frac{dB}{dP}$ от степени сжатия и даны уравнениями [21]:

$$B(\sigma) = B_0 \left(5\sigma^{5/3} - 4\sigma^{4/3} \right), \quad (8)$$

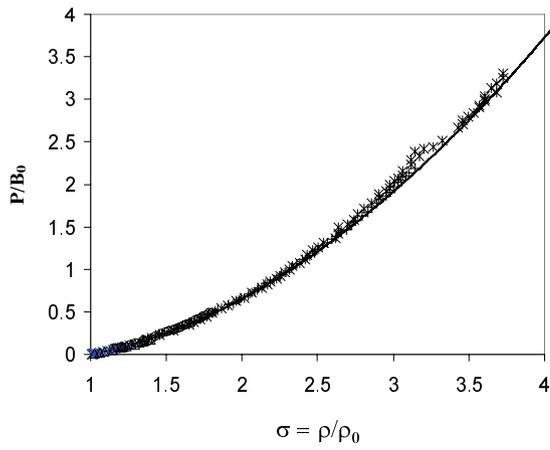
$$\frac{dB}{dP} = \frac{25\sigma^{1/3} - 16}{3(5\sigma^{1/3} - 4)}.$$

Как видно из уравнения (8), производная $B' = 3$ при $\sigma = 1$. Ее значение уменьшается с увеличением σ . Безразмерная форма уравнения (4)

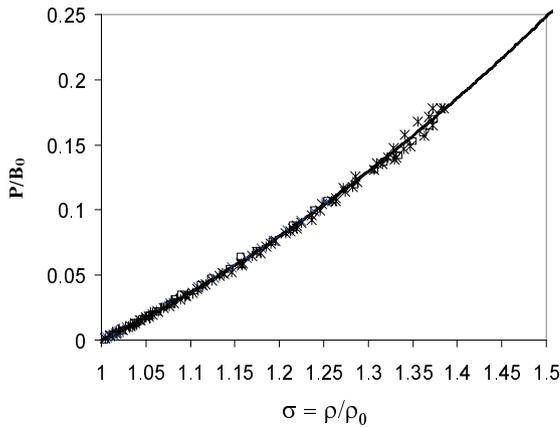
$$\frac{P}{3B_0} = \left(\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3} \right), \quad (9)$$

была тщательно подтверждена экспериментальными данными [26–36]. Сравнение безразмерного вида двухпараметрического универсального уравнения состояния с измерениями [26–36] выявило универсальный характер уравнения состояния, адекватно описывающего большое количество элементарных твердых тел и соединений. Дополнительные сравнения уравнения состояния (9) с экспериментальными данными для алмаза, бериллия, натрия, тантала и диоксида ниобия показаны на рис. 1.

Сопоставления, представленные на рис. 1, еще раз свидетельствуют об универсальности исследуемого двухпараметрического уравнения состояния и его способности с высокой степенью достоверности воспроизводить экспериментальные данные для различных металлов, диэлектриков и соединений. Универсальное уравнение состояния (уравнение 9) хорошо согласуется с экспериментальными данными при очень высоком давлении в области стабильности алмаза до $P > 1000$ ГПа.



а



б

Рис. 1. Зависимость приведенного холодного давления от степени сжатия. Сплошные линии и символы показывают теоретические расчеты с использованием двухпараметрического универсального уравнения состояния [20, 21] (уравнение 9) и экспериментальные данные соответственно. а – алмаз [28] (кресты), Ве [30] (треугольники), Ве [29] (кружки), Na [32] (+) и Na [33] (–); б – Nb [34] (квадраты), Ta [35] (x) и NbO₂ [36] (+)

Уравнение состояния алмаза и алмазная шкала давления

Экспериментальные данные по статическому сжатию алмаза. Статическое сжатие алмаза измерялось в работах [37–39] при $P < 40$ ГПа и в [28] при давлениях до 140 ГПа. Как видно из рис. 2, двухпараметрическое уравнение состояния отлично согласуется с измерениями на нормальной изотерме алмаза. Здесь важно отметить, что параметры УРС, объемный модуль сжатия $B_{00} = 442$ ГПа, взятый из высокоточных ультразвуковых измерений [32], и равновесная плотность $\rho_{00} = 3,515$ г·см⁻³ [33], являются строго экспериментальными.

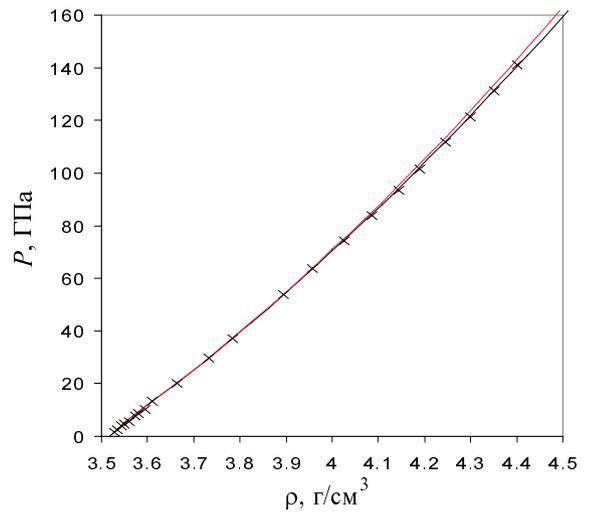


Рис. 2. Зависимость от плотности давления на нормальной изотерме алмаза. Кресты – экспериментальные точки из [28, 37–39]. Нижняя кривая – расчет по формуле (4) для нормальной изотермы (293 К), верхняя – расчет ударной адиабаты в гидродинамическом приближении (при всестороннем сжатии)

Изотермы алмаза при $T = 298, 500, 600, 750$ и 900 К были получены в эксперименте [42]. Как видно из рис. 3, наше уравнение состояния хорошо согласуется с экспериментальными данными. Некоторое различие в степени согласия (2) с экспериментальными данными из [42] и [28] при $P > 50$ – 60 ГПа связано с разными шкалами давления, использованными в [42] и [28]. В [42] применялась шкала давления Хольцапфеля [7], в то время как в [28] использовалась шкала Мао [3]. Как показывает сравнение экспериментальных данных и теоретических кривых, показанное на рис. 1 и 2, экспериментальные данные по шкале Мао лучше согласуются с теорией, чем по шкале Хольцапфеля.

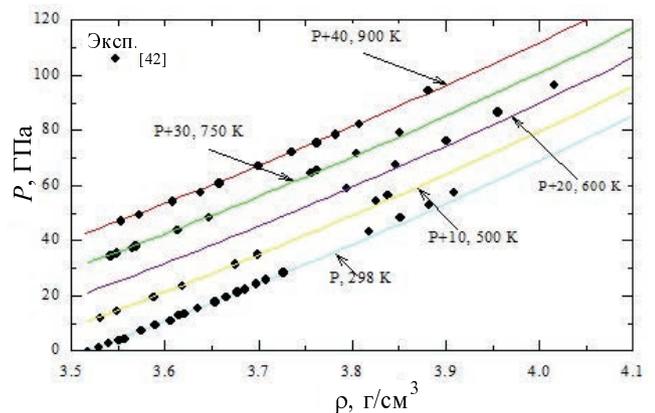


Рис. 3. $P(\rho)$ на изотермах алмаза. При $T = 298, 500, 600, 750$ и 900 К показаны $P, P + 10, P + 20, P + 30$ и $P + 40$ ГПа соответственно. Символы и сплошные кривые показывают экспериментальные данные [42] и наши теоретические кривые соответственно

На рис. 4 показаны наши теоретические изотермы и вклад теплового давления P_T в общее давление P в широком диапазоне давлений (0–500 ГПа) и температур (298–3500 К). Как видно из рис. 4, тепловое давление P_T на изотермах алмаза при низких температурах $T < 1000$ К уменьшается с ростом плотности из-за роста температуры Дебая T_D с ростом плотности. При более высоких температурах P_T растет практически линейно с ростом плотности. При полном давлении $P = 400$ ГПа и температуре $T = 2000$ К вклад P_T в полное давление не превышает 3 %. Это означает, что при высоких температурах P_c остается доминирующим фактором, влияющим на общее давление.

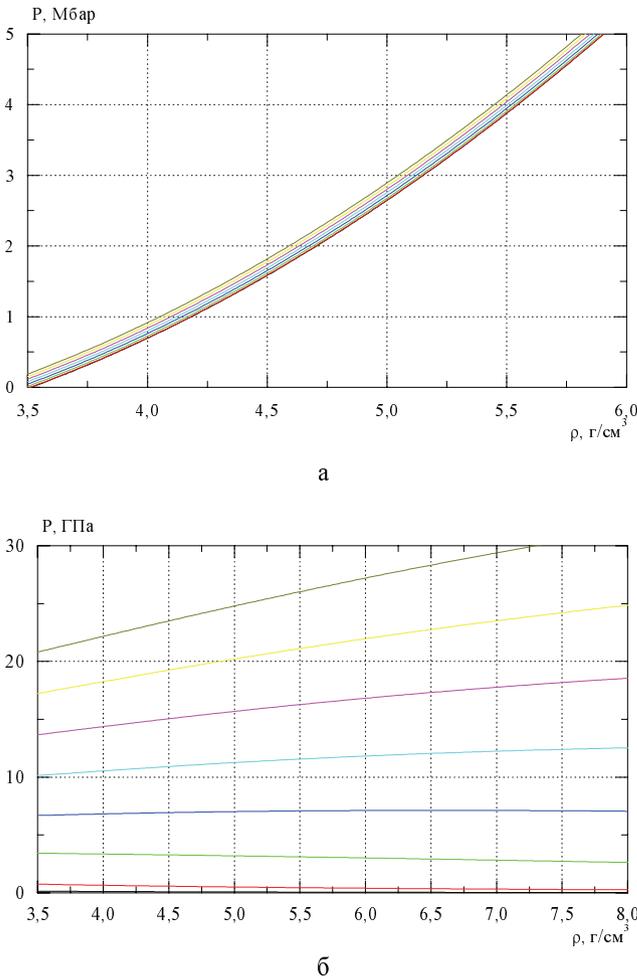


Рис. 4. $P(\rho)$ (а) и $P_T(\rho)$ (б) на изотермах алмаза при $T = 298, 500, 1000 \dots 3500$ К

Тепловая энергия в приближении Дебая выражается как

$$E_T = \frac{3RT}{A} 3 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{T_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

и, таким образом, теплоемкость при постоянном объеме определяется следующей формулой:

$$C_V = \frac{9R}{A} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{T_D/T} \frac{x^4 dx}{(e^x - 1)^2}. \quad (10)$$

Зависимость температуры Дебая от степени сжатия σ выражается формулой

$$T_D(\sigma) = T_{D0} (3\sigma^{4/3} - 2\sigma)^{1/2},$$

где $T_{D0} = 1860$ К [43] есть температура Дебая алмаза при $\sigma = 1$.

На рис. 5 показана температурная зависимость C_V и C_p для алмаза. Наш расчет хорошо описывает экспериментальные данные.

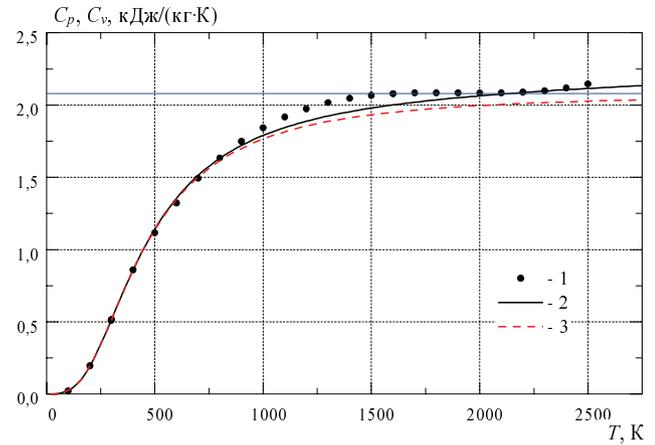


Рис. 5. Температурная зависимость C_V и C_p для алмаза. Черная сплошная линия, красная пунктирная линия и кружки относятся к теоретическим C_v , теоретическим C_p и экспериментальным данным [43, 44] соответственно

Плотность материала при постоянном давлении P можно определить по уравнению (2). При значениях P_c и P_T , заданных уравнениями (4) и (5) соответственно, мы получаем следующее выражение

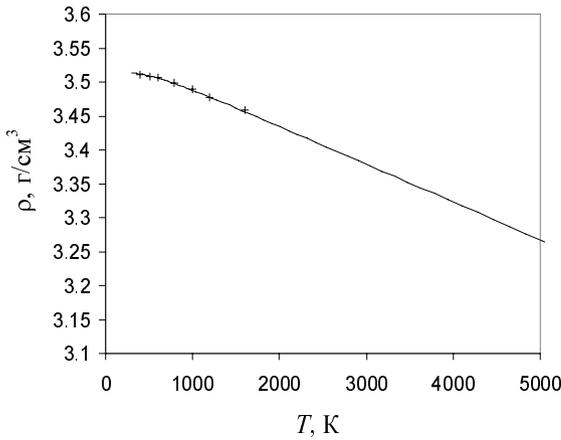
$$3B_0 (\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3}) + \Gamma \rho_0 \sigma E_T = P. \quad (11)$$

При постоянном давлении и переменной температуре или E_T можно использовать уравнение (11), чтобы получить температурную зависимость плотности материала, которая описывает тепловое расширение материала. При нулевом или стандартном давлении и постоянном значении Γ уравнение (11) имеет следующее простое аналитическое решение

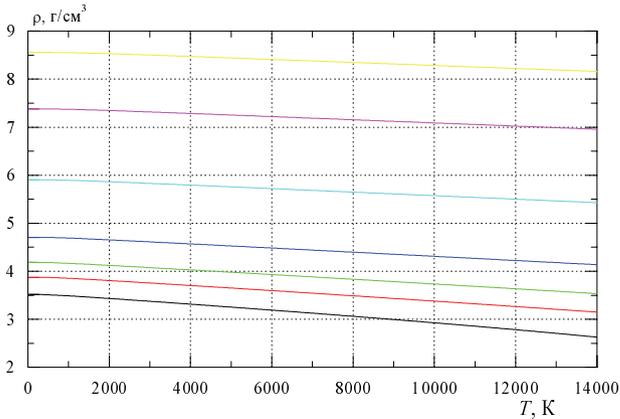
$$\sigma^{1/3} = \frac{1 + (1 - 4\Gamma \rho_0 E_{Th} / 3B_0)^{1/2}}{2}, \quad (12)$$

а в случае, когда $\Gamma = \Gamma(\sigma)$, оно может быть решено итерационно

Как видно из рис. 6,а, уравнение (21) прекрасно согласуется с экспериментами [45, 46]. На данный момент двухпараметрическое уравнение состояния алмаза было подтверждено экспериментальными данными по механическим и термодинамическим данным при давлениях до 140 ГПа и температурах до 2500 К, охватывающих весь диапазон условий в экспериментах по статическому сжатию. В следующих разделах УС оценивается по сравнению с ударно-волновыми экспериментальными данными при гораздо более высоком давлении до 1400 ГПа.



а



б

Рис. 6. Температурная зависимость плотности алмаза на нулевой изобаре (а) и плотности алмаза в зависимости от температуры на изобарах $P = 10^{-4}, 50, 100, 200, 500, 1000$ и 1500 ГПа (б). Сплошные линии и символы относятся к решению уравнения (11) и экспериментальные данные согласно [45, 46]

Ударное сжатие и ударная адиабата. Из законов сохранения массы, импульса и энергии на ударном скачке получаются уравнения:

$$\rho = \rho_{00}D/(D-u) \quad (13)$$

$$(P - P_0) = \rho_{00}Du, \quad (14)$$

$$(E - E_0) = (P + P_0)(1/\rho_{00} - 1/\rho)/2. \quad (15)$$

где ρ_{00}, P_0, E_0 – плотность, давление и энергия перед фронтом ударной волны, ρ, P, E – за фронтом ударной волны. Измерение скорости ударной волны D и массовой скорости u за фронтом ударной волны позволяет определить плотность ρ , давление P и энергию E за фронтом ударной волны. Эти измерения дают основной объем информации по параметрам веществ при высоких давлениях и температурах.

С другой стороны, параметры вещества за фронтом ударной волны можно определить исходя из уравнения состояния. Для уравнения состояния Ми–Грюнаузена тепловая энергия за фронтом ударной волны равна:

$$E_T = \frac{P - P_c}{\Gamma\rho}. \quad (16)$$

Подставляя выражение (1), (2) и (16) в (15) находим давление за фронтом УВ в зависимости от плотности:

$$P = \frac{P_C - \Gamma\rho(E_C - E_{C0} - E_{T0} - P_0(1/\rho_{00} - 1/\rho)/2)}{1 - \Gamma\rho(1/\rho_{00} - 1/\rho)/2}. \quad (17)$$

С $P_c(\sigma)$, заданным уравнением (4), можно использовать законы сохранения массы (23) и импульса (24) на фронте ударной волны, чтобы получить массовую скорость $u = \left(\frac{P(\sigma)(\sigma - 1)}{\rho_{00}\sigma}\right)^{1/2}$ и скорость ударной волны, $D = \sigma u/(\sigma - 1)$, которые дают параметрическую зависимость $D(u)$.

После подстановки выражений для $E_c(\sigma)$ и $P_c(\sigma)$, заданных уравнениями (3) и (4), соответственно, в правую часть (17), получаем уравнение для давления за фронтом ударной волны в зависимости от степени сжатия σ

$$P_H = \frac{3B_0 \left[\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3} - 1.5\Gamma\sigma \left((\sigma^{1/3} - 1)^2 - (\sigma_1^{1/3} - 1)^2 \right) \right] + \Gamma\rho_0\sigma E_{T0} + \Gamma P_0(\sigma/\sigma_1 - 1)/2}{1 - \Gamma(\sigma/\sigma_1 - 1)/2}, \quad (18)$$

где $\sigma = \rho/\rho_0, \sigma_1 = \rho_{00}/\rho_0$.

Для сыпучего пористого материала $P_{c0} = 0, E_{c0} = 0, E_{T0} = 0$ и в этом случае $P_H(\sigma)$ выражается как

$$P_H = \frac{3B_0 \left(\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3} - 1,5\Gamma\sigma \left(\sigma^{1/3} - 1 \right)^2 \right)}{1 - \Gamma(m\sigma - 1)/2},$$

где $m = 1/\sigma_1 = \rho_0/\rho_{00}$ – пористость материала.

Ударное сжатие алмаза: сравнение теории с экспериментом. Ударное сжатие алмаза исследовано экспериментально в [47–55]. В [49] представлены результаты экспериментов в области давления от 550 до 1400 ГПа, выполненных с на порядок более высокой точностью с использованием техники магнитного ускорения ударника. На рис. 7 показана зависимость скорости ударной волны D в алмазе от массовой скорости u . Кривая для ударной адиабаты представляет собой расчетную зависимость, полученную в гидродинамическом приближении с использованием упругой кривой (4), которая, как видно на рис. 1 и 2, хорошо описывает данные статических экспериментов [38–42]. На распространение ударной волны заметное влияние оказывает высокое значение предела текучести алмаза. Гидродинамическое приближение выполняется, когда вещество переходит в жидкое состояние. Три точки для алмаза с плотностью $3,2 \text{ г/см}^3$ [48] хорошо описываются таким же расчетом с пористостью $1,097$ ввиду высокого нагрева и плавления материала за фронтом ударной волны. При давлении выше 800 ГПа точки [49] в образцах плотного (непористого) алмаза близки к расчетной кривой в гидродинамическом приближении, что согласуется с плавлением алмаза при этих давлениях [49]. Влияние упругопластических свойств алмаза на параметры ударной волны исследуется в работах [14–16].

На рис. 8 показана зависимость от плотности давления за фронтом ударной волны в алмазе $P(\rho)$. Видно, что гидродинамическое приближение дает давление ниже, чем экспериментальные данные [33, 34]. Описание экспериментальных данных получается при учете прочности алмаза. При низких давлениях в ударной волне происходит продольное, а не всестороннее сжатие. Напряжение при продольном сжатии выражается в виде $P = E\Delta l/l$, где E – модуль Юнга, $\Delta l/l$ – относительное изменение размеров. После достижения предела текучести (Y) напряжение за фронтом плоской ударной волны превышает давление за счет гидростатического сжатия на две трети предела текучести ($2Y/3$). С пределом текучести алмаза 70 ГПа наш расчет проходит через экспериментальные точки [33, 34].

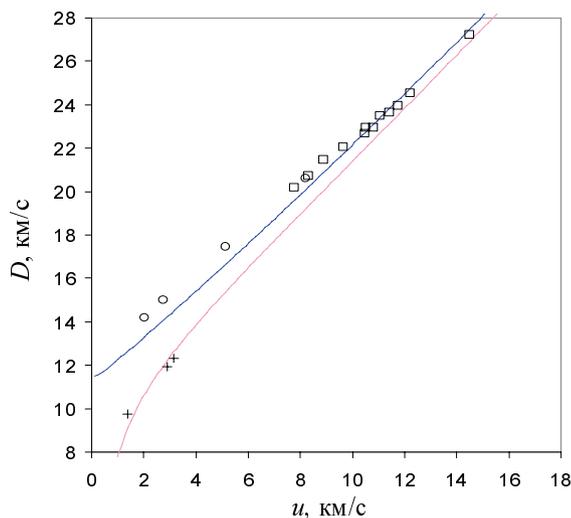


Рис. 7. Зависимость скорости ударной волны D в алмазе от массовой скорости u . Экспериментальные точки: для алмаза с плотностью $3,515 \text{ г/см}^3$ – круги из [47], квадраты из [49], плюсы – для алмаза с плотностью $3,2 \text{ г/см}^3$ [48]. Кривые – наши расчеты ударных адиабат в гидродинамическом приближении с использованием формулы (4) для упругого давления

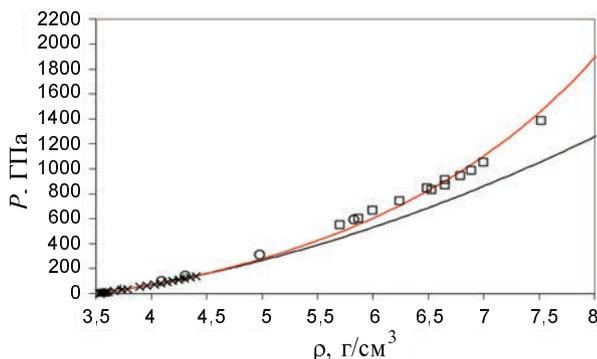


Рис. 8. Зависимость от плотности давления за фронтом ударной волны в алмазе. Экспериментальные точки: круги – из [47], квадраты – из [49]. Кресты – точки из [38–42] на нормальной изотерме алмаза. Красная кривая сверху – наш расчет ударной адиабаты непористого алмаза в гидродинамическом приближении с использованием формулы (4) для упругого давления, черная кривая снизу – расчет по формуле (4) для нормальной изотермы (293 К)

В работе [56] исследованы кристаллические структуры пиролитического графита ($\rho_{00} = 2,21 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$) и пористого поликристаллического графита ($\rho_{00} = 1,84 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$) за фронтом ударной волны при давлениях до 200–250 ГПа. Измерения показывают, что переход от графита к алмазу наблюдается при $P > 50$ ГПа. При $P > 50$ ГПа наша теория, как видно из рис. 9, с высокой степенью достоверности воспроизводит ударно-волновые эксперименталь-

ные данные для пористого пиролитического графита – низкоплотной фазы углерода. Они используют функцию Грюнайзена и температуры Дебая для алмаза и равновесную плотность пористого пиролитического графита, и гораздо лучше согласуется с экспериментами [55, 56], чем другие теории.

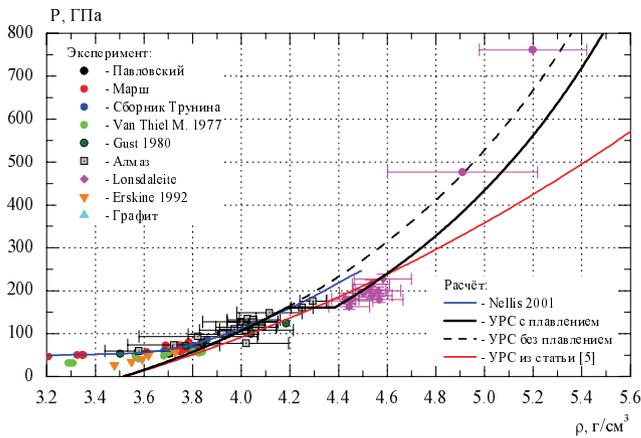


Рис. 9. $P(\rho)$ за фронтом ударной волны в пиролитическом графите. Символы и линии относятся к экспериментальным данным и теоретическим кривым из настоящего исследования

В том же экспериментальном исследовании [56] превращение пиролитического графита в лонсдейлит наблюдалась при $P > 170$ ГПа. Если предположить, что лонсдейлит является аморфным алмазом, то пиролитическое превращение графита в лонсдейлит сопровождается поглощением скрытой теплоты плавления алмаза. Сравнение теоретического значения $P(\rho)$, полученного в предположении, что превращение графита в лонсдейлит сопровождается плавлением, с экспериментальными данными [56] показано на рис. 9. Сравнение показывает очень хорошее согласие между теорией, развитой в настоящем исследовании, и измерениями. В [55] сообщалось о двух экспериментальных точках данных для графита при $P = 480$ и 750 ГПа. Как видно из рис. 9, теоретическое $P(\rho)$, учитывающее плавление, гораздо лучше согласуется с измерениями, чем расчеты ab initio [55].

Эти соображения позволяют сделать вывод, что универсальное уравнение состояния (уравнение (4)) с ρ_0 и B_0 для алмаза $3,515 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ и 442 ГПа соответственно очень хорошо согласуется с экспериментальными данными по статическому и ударному сжатию при давлениях до 1000 ГПа и температур до 2000 К, охватывающих весь диапазон условий экспериментов с алмазными наковальнями. Это, в свою очередь, указывает на то, что уравнение (4) с $\rho_0 = 3,515 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ и $B_0 = 442$ ГПа

$$P_C(\rho) = 3B_{00} \left(\left(\frac{\rho}{\rho_{00}} \right)^{5/3} - \left(\frac{\rho}{\rho_{00}} \right)^{4/3} \right), \quad (19)$$

может быть рекомендовано для использования в качестве новой алмазной шкалы давления при P до 1000 ГПа.

Новая рубиновая шкала давления, эквивалентная алмазной шкале

Уравнение (19) также использовалось для построения новой рубиновой шкалы, которая согласуется с нашей алмазной шкалой. Чтобы вывести новую шкалу, мы используем $P_C(\rho)$, заданную нашей алмазной шкалой, и смещение линии R1 в рубине $\Delta\lambda = \Delta\lambda(\rho)$ как функцию плотности алмаза ρ . Легче всего это можно сделать, измеряя в одном опыте плотность алмаза и смещение линии R1 в рубине. Однако нам не удалось найти таких измерений. Поэтому воспользуемся тем, что в работе [10] изотермы алмаза и большого набора металлов получены по следующей шкале рубина:

$$P = 1870 \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \left(1 + 6,0 \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right). \quad (20)$$

Уравнение (20) дает нам следующее уравнение для обратной функции $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}(P)$:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = -\frac{1}{12} + \left(\frac{1}{144} + \frac{1}{6} \frac{P}{1870} \right)^{1/2}. \quad (21)$$

Затем с давлением P из таблицы 1S (дополнительная информация) в [10] мы используем уравнение (21) для определения значений $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}(P)$. Так как значения давления P в табл. 3 в [10] соответствуют значениям плотности алмаза ρ , сразу получаем $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}(\rho)$. Затем $\rho(P)$ для алмаза, заданное уравнением (19), подставляется в $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}(\rho)$. В результате мы получаем новую рубиновую шкалу давления, которая согласуется с нашей алмазной шкалой.

Новая рубиновая шкала, аппроксимирующая численное решение с точностью $\sim 1\%$, определяется следующей формулой

$$P\left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0}\right) = \frac{1904}{7,2} \left(\left(1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0}\right)^{7,2} - 1 \right). \quad (22)$$

Уравнение (22) отличается от шкалы [3] показателем степени в правой части, где 7,665 в формуле [3] (уравнение 1) заменено на 7,2. Отличие рубиновой шкалы [10] от нашей рубиновой шкалы связано с отличием нулевой и нормальной изотерм алмаза [10] от полученных в [28] и настоящей работе.

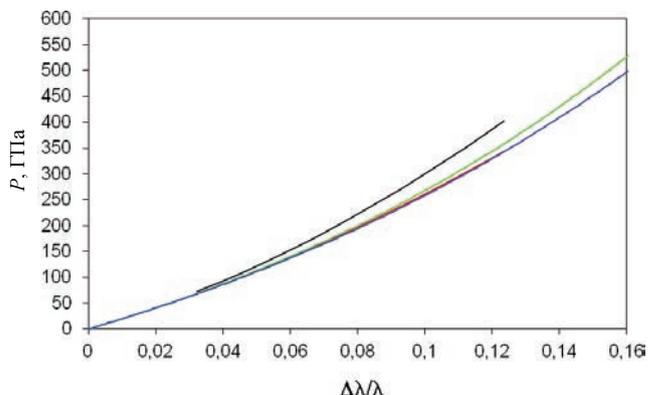


Рис. 10. Зависимость смещения линии флуоресценции R1 в рубине от давления по шкале (30) согласно [10] (черная верхняя линия), алмазной шкале (красная сплошная линия), шкале [3] (зеленая сплошная линия) и новая рубиновая шкала (32) в настоящем исследовании (синяя сплошная линия)

Сравнение зависимостей $P(\rho)$ для шкалы [10], шкалы [3] и новой шкалы рубина (22) показаны на рис. 10. Как видно из рис. 10, шкала [3] хорошо согласуется с новой рубиновой шкалой при $P < 200$ ГПа. При $P = 200$ ГПа шкала [3] завышает давление по сравнению с новой рубиновой шкалой всего на $\sim 2\%$, а шкала [10] уже на $\sim 13\%$. Завышения растут с увеличением P и достигают 3,5 и 16% соответственно при $P = 400$ ГПа. Эти соображения приводят нас к выводу, что новая рубиновая шкала, основанная на алмазной шкале (22), проверенной в экспериментах по статическому и ударному сжатию при P до 1000 ГПа, может быть рекомендована для использования в диапазоне давлений 0–1000 ГПа.

Основные источники систематических ошибок в холодных кривых, полученных на основе экспериментальных адиабат Гюгиони

При $P = 100\div 400$ ГПа на изотермах металлов давления, полученные с использованием уравнения (4), ниже, чем в [10], где холодные кривые

получены из экспериментальных ударных адиабат. Здесь мы показываем, что основными источниками систематических ошибок холодного давления, полученных на основе экспериментальных ударных адиабат, являются: 1) неопределенности термодинамических свойств при высоких давлениях и высоких температурах; 2) неучтенные воздействия прочности материала и 3) электронные фазовые переходы и образование фаз высокого давления за фронтом ударной волны.

Термодинамические свойства материалов при высоких давлениях и высоких температурах могут быть одним из основных источников систематических ошибок при теоретической интерпретации экспериментальных адиабат Гюгиони. Основным источником неопределенностей в модели Ми–Грюнайзена является коэффициент Грюнайзена. Неопределенности в коэффициенте Грюнайзена напрямую влияют на тепловое давление за фронтом ударной волны и, следовательно, приводят к ошибкам в холодном давлении, полученном из экспериментальных адиабат Гюгиони.

Обычно используется ряд аппроксимаций зависимости коэффициента Грюнайзена от плотности, таких как $\Gamma\rho = \text{const}$, $\Gamma\rho^{1/2} = \text{const}$ и $\Gamma\rho^q = \text{const}$, где q может достигать 2,7 [55]; однако ни один из них так и не получил фундаментального обоснования. Другой, менее распространенный метод определения коэффициента Грюнайзена основан на применении теории колебаний. В этом случае его получают из объемной или плотностной зависимости холодного давления и энергии [27]; однако диапазон достоверности и точность такого подхода еще предстоит определить.

УРС Вине с коэффициентом Грюнайзена, аппроксимированным по [42] $\Gamma(\sigma) = 0,85/\sigma^{3,6}$, представляет собой прекрасный пример сильного влияния неопределенностей при расчете теоретической кривой Гюгиони. Как видно из рис. 11, рассчитанная таким образом теоретическая кривая Гюгиони для алмаза практически не отличается от нормальной изотермы при давлениях, значительно превышающих 1000 ГПа. Это означает, что тепловое давление P_T в [42] сильно занижено, что приводит к завышению холодного давления $P_C = P - P_T$. Завышение P_C из-за использования чрезвычайно сильной зависимости коэффициента Грюнайзена от плотности достаточно велико и превышает 30% при $\rho = 7,5 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. Другие иллюстрации нефизического поведения теоретической кривой Гюгиони с уравнением Вине [42] с сильной зависимостью коэффициента Грюнайзена от плотности (напри-

мер, $\Gamma = 0,07$ при $\sigma = 2$) $\Gamma(\sigma)$ включают достижение очень высоких степеней сжатия $\sigma = 2/\Gamma + 1$, которые никогда не наблюдались в экспериментах, а также неспособность данной теории предсказать предельное сжатие.

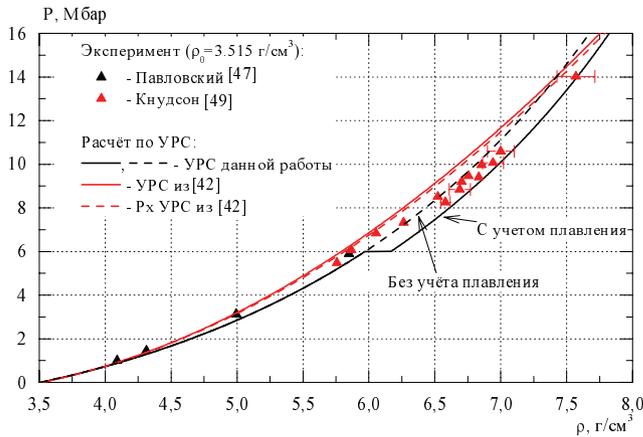


Рис. 11. $P(\rho)$ на адиабате Гюгонию алмаза ($\rho_0 = 3,515 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$) за фронтом ударной волны: наш расчет – две нижние кривые, расчет [42] – верхние

Электронные фазовые переходы и их влияние на уравнение состояния

В работе [13] приводятся результаты измерений при 300 К в осмии давлений до 750 ГПа. Давление определялось по уравнению состояния золота, платины и вольфрама. Определение давления разных авторов [57–59] дает отличающиеся результаты, например в работе [58] давление заметно ниже. Пересчет данных [13] на алмазную шкалу давления дает значения давлений в осмии, близкие к нашему расчету для исходной фазы осмия изотермы 300 К по уравнению состояния (4) с $B_0 = 425 \text{ ГПа}$ и $\rho_0 = 22,613 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ (рис. 12). Пересчитанные точки до давления 350 ГПа хорошо описываются нашей расчетной изотермой осмия. Синяя линия – наша расчетная ударная адиабата. Точки [13] на изотерме 300 К проходят заметно выше ударной адиабаты. Сопоставление пересчитанных данных [13] с нашей расчетной изотермой указывает на возможность фазового превращения в осмии выше 350 ГПа. Точки при давлении выше 350 ГПа описываются уравнением состояния (4) с $B_0 = 710 \text{ ГПа}$ и $\rho_0 = 25,78 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. Для исходной фазы металлического осмия энергия внешних электронов атомов близка к сумме пяти потенциалов ионизации свободного атома осмия, а для фазы высокого давления – к сумме шести потенциалов

ионизации. Поэтому в исходном состоянии Os является пятивалентным металлом, а при давлении выше 350 ГПа – шестивалентным металлом.

Калибровочные данные на нормальной изотерме вольфрама в [13] проходят до 500 ГПа по точкам экспериментальной ударной адиабаты [50]. Пересчет на алмазную шкалу давления дает значения давлений, близкие к нашему расчету для фазы высокого давления W . Параметры по уравнению состояния (4) исходной фазы W : $B_0 = 330 \text{ ГПа}$ и $\rho_0 = 19,31 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$.

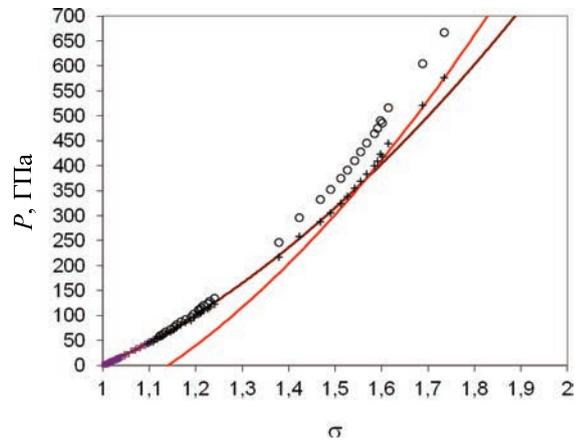


Рис. 12. Зависимость давления от степени сжатия σ на изотерме 300 К в осмии. Квадраты – данные [57] до 58 ГПа. Коричневая кривая – наш расчет изотермы 300 К для осмия по уравнению состояния (4) с $B_0 = 425 \text{ ГПа}$ и $\rho_0 = 22,613 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$, который хорошо описывает данные [57]. Кружки – результаты измерений [13] с использованием шкалы давлений Au, Pt, W. Кресты – наш пересчет данных [13] на алмазную шкалу давлений. Пересчитанные точки до давления 420 ГПа хорошо описываются нашей расчетной изотермой осмия. Точки [13] на изотерме 300 К проходят заметно выше расчетной ударной адиабаты

Переход в электронную фазу высокого давления по нашим расчетам происходит при $\sim 130 \text{ ГПа}$. Параметры этой фазы $B_0 = 510 \text{ ГПа}$, $\rho_0 = 20,78 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ (рис. 13). Как и в случае осмия, в исходном состоянии вольфрам – пятивалентный металл, в фазе высокого давления выше 130 ГПа – шестивалентный металл. Переход в рении, иридии и платине происходит при 70, 60 и 100 ГПа соответственно (рис. 14–16). Эти превращения могут быть связаны с переходом 5d внутренних электронов на внешнюю 6s оболочку из-за низкой энергии связи 5d электронов в этих переходных металлах (0,5–6 эВ) [61]. Аналогичные переходы происходят в 3d и 4d металлах. Анализ влияния давления на электронную структуру переходных металлов приведен в работе [62].

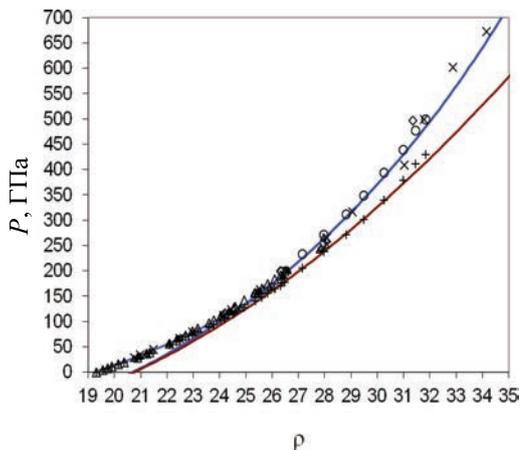


Рис. 13. Зависимость давления от плотности ρ на ударной адиабате и изотерме 300 К в вольфраме. Треугольники – данные из [48], ромбы – из [63], кресты – из [60]. Коричневая кривая – наш расчет изотермы 300 К для W по уравнению состояния (4) с $B_0 = 510$ ГПа и $\rho_0 = 20,78$ г·см⁻³, который хорошо описывает данные [60]. Кружки – результаты измерений [13] с использованием шкалы давлений Au, Pt, W. Плюсы – наш пересчет данных [13] на алмазную шкалу давлений. Пересчитанные точки до давления 420 ГПа хорошо описываются нашей расчетной изотермой фазы высокого давления вольфрама. Синяя линия – наша расчетная ударная адиабата. Точки [13] на изотерме 300 К вольфрама проходят по ударной адиабате

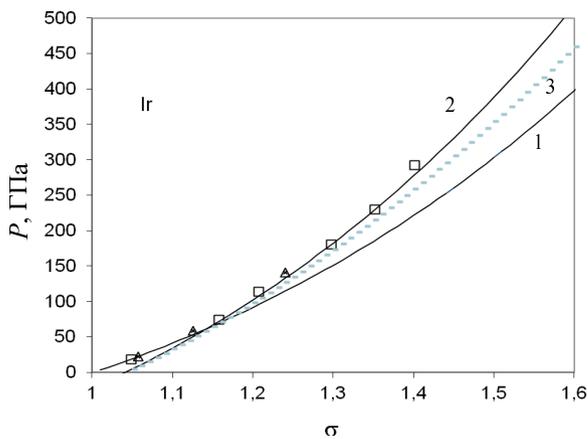


Рис. 14. Зависимость давления от степени сжатия σ на ударной адиабате иридия. Квадраты – данные из [48], треугольники – из [64]. Кривая 1 – наш расчет для исходной фазы Ir по уравнению состояния (4), кривая 2 – для фазы высокого давления Ir. Пунктирная кривая 3 – наша теоретическая кривая для изотермы 300 К фазы высокого давления иридия

В [13, 57–59] приводится сравнение объемного модуля осмия при нормальных условиях с объемным модулем алмаза. По нашим данным он не выше, чем в алмазе. Однако фазы высокого давле-

ния переходных 5d металлов могут иметь объемный модуль, значительно превышающий объемный модуль алмаза. Важной научной задачей может быть исследование возможности стабилизации фаз высокого давления этих металлов при нормальных условиях за счет легирования. При еще больших статических давлениях возможен переход 5d металлов в семивалентное состояние с еще большей величиной объемного модуля.

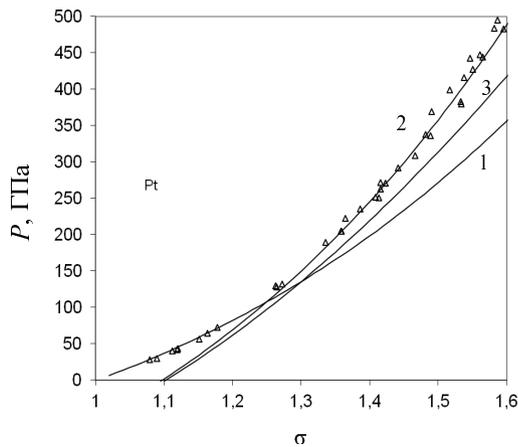


Рис. 15. Зависимость давления от степени сжатия σ на ударной адиабате платины. Треугольники – данные из [48]. 1 – наш расчет для исходной фазы Pt по уравнению состояния (4), 2 – для фазы высокого давления Pt. 3 – наша теоретическая кривая для изотермы 300 К фазы высокого давления платины

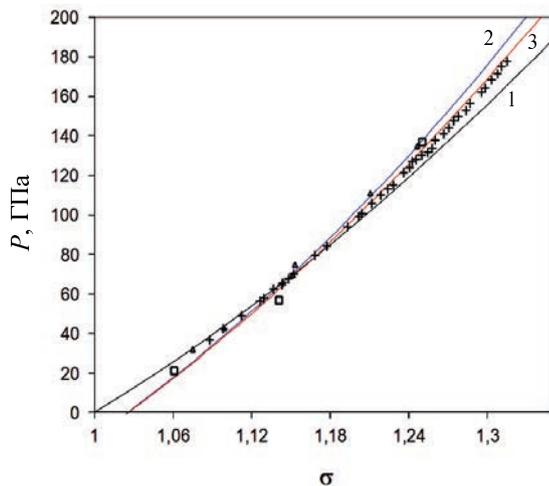


Рис. 16. Зависимость давления от степени сжатия σ на ударной адиабате и нормальной изотерме рения. Треугольники – данные из [48], квадраты – из [64]. Плюсы – данные [65] для нормальной изотермы рения. 1 – наш расчет для исходной фазы Re по уравнению состояния (4), 2 – для фазы высокого давления Re. 3 – наша теоретическая кривая для изотермы 300 К фазы высокого давления рения

В таблице приведены параметры 5d и 4d переходных металлов: равновесная плотность ρ_{n0} и объемный модуль B_{n0} при $P = 0, T = 0$, энергия E_n и число N внешних (валентных) электронов на атом металла, область давлений существования данной электронной фазы металла. Многие из них рассматриваются для использования в качестве шкалы давления [66–75]. Из всех металлов только осмий сохраняет стабильность электронной и кристаллической структуры до 350 ГПа. Наряду с алмазом осмий может использоваться в качестве шкалы давления. Из соединений высокой стабильностью обладает стишовит, SiO_2 .

На рис. 17 показано сравнение теоретических ударных адиабат, построенных с использованием универсального холодного уравнения состояния (4) для трех электронных фаз молибдена, с экспериментальными данными [48, 64]. Параметры уравнения состояния электронных фаз Мо приведены в таблице. Исходная фаза существует до давления около 50 ГПа. Переход в состояние третьей фазы происходит при давлении 180 ГПа. Параметры этой фазы описывают экспериментальные данные [64] до давления 2000 ГПа (смотри на рис. 18).

Параметры 5d и 4d переходных металлов

Элемент	$\rho_n, \text{г/см}^3$	$B_{n0}, \text{ГПа}$	$E_n, \text{эВ}$	N	Область давлений, ГПа	E_n атома, эВ
W	19.27	325	144	5	0-130	133
W	20.80	522	212	6	130-500	194
Re	21.03	370	153	5	0-70	149
Re	21.66	540	217	6	70-200	213
Os	22.613	425	167	5	0-350	144
Os	25.55	710	247	6	350-700	212
Ir	22.56	365	145	5	0-60	150
Ir	23.46	600	229	6	60-300	222
Pt	21.494	290.6	123	4-5	0-40	97-152
Pt	22.32	472	192	5	40-100	152
Pt	23.66	643	247	6	100-500	227
Nb	8.6	172	87	4	0-80	87
Nb	9.59	305	138	5	80-200	137
Mo	10.22	278	122	4	0-50	99
Mo	10.435	335	144	5	50-190	160
Mo	11.06	510	206	6	190-500	227
Rh	12.42	290	112	4	0-50	102
Rh	12.92	440	163.5	5	50-200	169
Pd	12.02	184	76	3	0-15	61
Pd	12.345	290	117	4	15-90	110
Pd	13.34	522	194	5	90-250	176
LiH	0.80	35	16.3	2	0-250	
Na	1.00	7.8	8.4	1	0-8	5.14
Na	1.18	15.7	14.3	1-2	8-160	5.14-52.4
Mg	1.75	36.1	23.4	2	0-7	22.7
Mg	1.83	52	32.2	2-3	7-200	22.7-101
Au	19.3828	178.6	85	3-4	0-10	60-104
Au	19.66	260	122	4	10-80	104
Au	20.82	380	168	5	80-180	162
Au	23.7	820	318	7	180-450	331
Ta	16.6964	200	101	4-5	0-50	80-125
Ta	17.2	250	123	5	50-340	125
Ta	22	630	242	7	340-1100	260
Al	2.71	81.3	40	2-3	0-15	25
Al	2.85	123	54	3	15-300	53
Ag	10.54	114	100	4	0-14	107
Ag	10.9	184	156	5	14-90	177
Ag	12.74	483	350	7	90-340	382
Zr	6.54	86.3	56.2	3	0-80	44
Zr	7.70	160	88.4	4	80-200	78
Cu	9.0	150	49.4	2-3	0-20	28-65
Cu	9.7	283	86.5	3-4	20-120	65-124
Cu	10.6	467	130.6	5	120-500	124

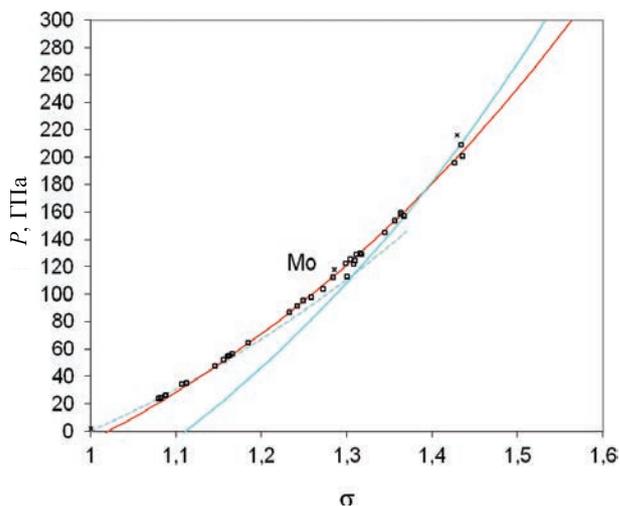


Рис. 17. Зависимость давления от степени сжатия (плотности) при ударно-волновом сжатии молибдена. Квадраты – данные [48], кресты – из [64], кривые – наш расчет для трех электронных фаз молибдена

В экспериментах по рассеянию нейтронов в Мо [66] была зафиксирована аномально высокая температура за фронтом ударной волны при $P = 66$ ГПа. Наши расчеты, как показано на рис. 19, доказывают, что основной причиной этой аномалии является электронный фазовый переход. Как видно из рис. 19, сжатие новой «пористой» по сравнению с исходной фазы приводит к значительному повышению температуры при идентичных термодинамических параметрах исходной фазы.

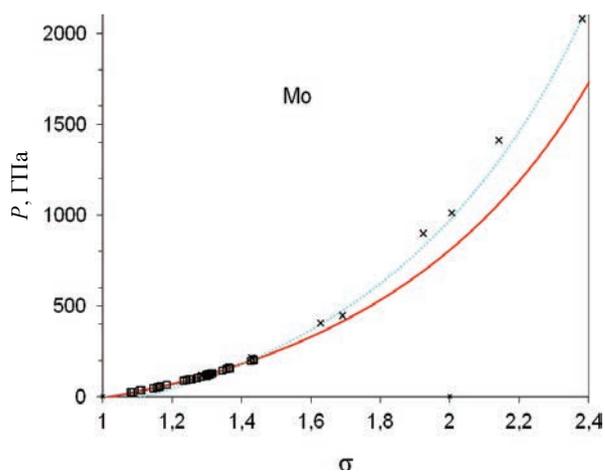


Рис. 18. Ударная адиабата молибдена при высоком давлении. Экспериментальные точки из [48, 64]. Кривые для второй и третьей электронной фазы Мо

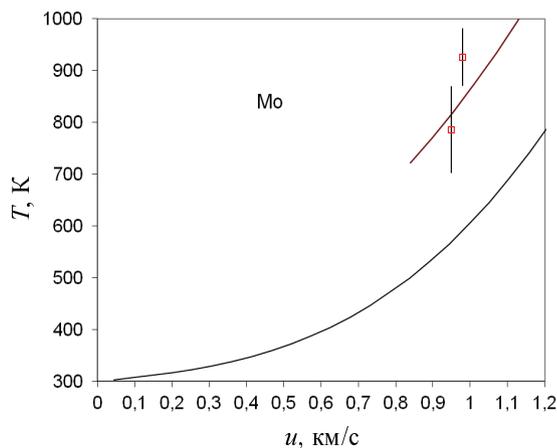


Рис. 19. Зависимость температуры за фронтом ударной волны от массовой скорости в Мо. Экспериментальные точки [66] приведены при давлении $P = 66$ ГПа. Они принадлежат новой электронной фазе, имеющей плотность при $P = 0$ большую, чем плотность начальной фазы. Нижняя кривая – наш расчет температуры в начальной фазе Мо, верхняя – в фазе высокого давления. При давлении $P = 66$ ГПа температура в фазе высокого давления на 200 К выше, чем в исходной фазе

Заключение

В данной работе исследовано поведение материалов при высоких давлениях и высоких температурах. Разработана и подтверждена экспериментально теория механических и термодинамических свойств материалов при высоких давлениях и температурах, которая может быть использована в ряде областей фундаментальной и прикладной физики и материаловедения.

Проверено универсальное двухпараметрическое аналитическое уравнение состояния, описывающее холодное давление. Новое уравнение состояния алмаза

$$P_C(\rho) = 1326 \left(\left(\frac{\rho}{3,515} \right)^{5/3} - \left(\frac{\rho}{3,515} \right)^{4/3} \right) \quad (23)$$

(плотность в $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$, давление в ГПа), не содержащее подгоночных параметров и применимое к высоким давлениям и температурам, проверено на основе экспериментальных данных по статическому и ударно-волновому сжатию. Сравнение показывает, что новое уравнение состояния алмаза (23) отлично согласуется как со статическими, так и с ударно-волновыми экспериментами при давлениях до 1000 ГПа. Таким образом, уравнение состояния алмаза можно рекомендовать для использования в качестве новой шкалы давления, где

плотности алмаза и исследуемого материала определяются рентгеноструктурным методом, давление $P(p)$ – через наше уравнение состояния алмаза.

На основе уравнения состояния алмаза, полученного в настоящем исследовании, создана новая рубиновая шкала давления

$$P = \frac{1904}{7,2} \left(\left(1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^{7,2} - 1 \right),$$

которая соответствует нашей алмазной шкале. Было показано, что в то время как новая рубиновая шкала и шкала Мао 1986 очень хорошо согласуются при $P < 200$ ГПа, шкалы давления, полученные на основе ударно-волновых экспериментальных данных при высоком давлении [4–10], систематически завышают холодное давление. Установлено, что основными источниками систематических ошибок в шкалах давлений, полученных из ударно-волновых экспериментальных данных при высоких давлениях, являются неопределенности в коэффициентах Грюнайзена, неучтенный предел текучести и электронный фазовый переход за фронтом ударной волны. Мы показали, что учет прочности материала необходим в случае материалов высокой прочности (алмаз, нитрид бора, стишовит, рубин/корунд и др.), так как в этом случае давление за фронтом плоской ударной волны превышает расчетное давление в гидродинамическом приближении (без учета прочности материала) на две трети предела текучести. На примере молибдена показана важность учета фазовых переходов и последующего образования фаз высокого давления. В частности, показано, что аномально высокая температура за фронтом ударной волны, зарегистрированная в экспериментах по рассеянию нейтронов в молибдене [66] при $P = 66$ ГПа, обусловлена электронным фазовым переходом.

Список литературы

1. Forman, R. A., Piermarini, G. J., Barnett, J. D., & Block, S. (1972). Pressure measurement made by the utilization of ruby sharp-line luminescence. *Science*, 176(4032), 284-285.
2. Mao, H. K., & Bell, P. M. (1976). High-pressure physics: The 1-megabar mark on the ruby R 1 static pressure scale. *Science*, 191(4229), 851-852.
3. Mao, H. K., Xu, J. A., & Bell, P. M. (1986). Calibration of the ruby pressure gauge to 800 kbar under quasi-hydrostatic conditions. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 91(B5), 4673-4676.

4. Aleksandrov, I., Goncharov, A. F., Zisman, A. N., & Stishov, S. (1987). Diamond at high pressures: Raman scattering of light, equation of state, and high pressure scale. *Zh. eksp. teor. Fiz*, 93, 680-691.
5. Zha, C. S., Mao, H. K., & Hemley, R. J. (2000). Elasticity of MgO and a primary pressure scale to 55 GPa. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 97(25), 13494-13499.
6. Fei, Y., Li, J., Hirose, K., Minarik, W., Van Orman, J., Sanloup, C., ... & Funakoshi, K. I. (2004). A critical evaluation of pressure scales at high temperatures by in situ X-ray diffraction measurements. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 143, 515-526.
7. Holzapfel, W. B. (2005). Progress in the realization of a practical pressure scale for the range 1–300 GPa. *High Pressure Research*, 25(2), 87-99.
8. Chijioke, A. D., Nellis, W. J., Soldatov, A., & Silvera, I. F. (2005). The ruby pressure standard to 150 GPa. *Journal of Applied Physics*, 98(11), 114905.
9. Zhuravlev, K. K., Goncharov, A. F., Tkachev, S. N., Dera, P., & Prakapenka, V. B. (2013). Vibrational, elastic, and structural properties of cubic silicon carbide under pressure up to 75 GPa: Implication for a primary pressure scale. *Journal of Applied Physics*, 113(11), 113503.
10. Sokolova, T. S., Dorogokupets, P. I., & Litsov, K. D. (2013). Self-consistent pressure scales based on the equations of state for ruby, diamond, MgO, B2–NaCl, as well as Au, Pt, and other metals to 4 Mbar and 3000 K. *Russian Geology and Geophysics*, 54(2), 181-199.
11. Lawson, A. W. and Tang, T. Y., 1949. Concerning the high pressure allotropic modification of cerium. *Physical Review*, 76(2), p.301.
12. Steinheimer R. 1950. *Physical Review*, 78(3), p. 234
13. L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaia, E. Bykova, M. Bykov, V. Prakapenka at al. The most incompressible metal osmium at static pressure 750 gigapascals. *Letter Nature* 14681 (2015).
14. McWilliams, R. S., Eggert, J. H., Hicks, D. G., Bradley, D. K., Celliers, P. M., Spaulding, D. K., ... & Jeanloz, R. (2010). Strength effects in diamond under shock compression from 0.1 to 1 TPa. *Physical Review B*, 81(1), 014111.
15. Lang J.M., Gupta Y.M. Strength and elastic deformation of natural and synthetic diamond crystals shock compressed along [100]. *J. Appl. Phys.* **107**, 113538 (2010)
16. Zouboulis, E. S., Grimsditch, M., Ramdas, A. K., & Rodriguez, S. (1998). Temperature de-

pendence of the elastic moduli of diamond: A Brillouin-scattering study. *Physical Review B*, 57(5), 2889.

17. Hu, Q. and Mao, H. K., 2021. Born's valence force-field model for diamond at terapascals: Validity and implications for the primary pressure scale. *Matter and Radiation at Extremes*, 6(6), p.068403.

18. Hu, Q., Li, B., Gao, X., Bi, Y., Su, L. and Mao, H. K., 2021. Ultrasound elasticity of diamond at gigapascal pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118(51), p.e2118490118.

19. Shen, G., Wang, Y., Dewaele, A., Wu, C., Fratanduono, D. E., Eggert, J., ... & IPPS task group. (2020). Toward an international practical pressure scale: A proposal for an IPPS ruby gauge (IPPS-Ruby2020). *High Pressure Research*, 40(3), 299-314.

20. Надыкто Б. А. Доклады АН СССР, т. 316, № 6, 1991.

21. Надыкто Б. А. УФН. 1993. Т. 163, № 9. С. 37.

22. Надыкто Б. А. (1996) ВАИТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. Вып. 3. С. 58.

23. Nadykto B. A. In *New Models and Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media*, edited by I.G. Cameron. Oxford: AWE Hunting BRAE, 1998. P. 205.

24. Надыкто Б.А. Электронные фазы твердых тел. 2001. Российский химический журнал РХО им. Менделеева, 2001, XLV, № 5-6, 7-15. .

25. Birch, F. (1947). *Finite elastic strain of cubic crystals. Physical review*, 71(11), 809.

26. Murnaghan, F. D. (1944). *The compressibility of media under extreme pressures. Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247.

27. Dugdale, J. S., & MacDonald, D. K. C. (1953). The thermal expansion of solids. *Physical Review*, 89(4), 832.

28. O Occelli, F., Loubeyre, P., & LeToullec, R. (2003). Properties of diamond under hydrostatic pressures up to 140 GPa. *Nature materials*, 2(3), 151-154.

29. Evans, W. J., Lipp, M. J., Cynn, H., Yoo, C. S., Somayazulu, M., Häusermann, D., ... & Prakapenka, V. (2005). X-ray diffraction and Raman studies of beryllium: Static and elastic properties at high pressures. *Physical Review B*, 72(9), 094113.

30. Velisavljevic, N., Chesnut, G. N., Vohra, Y. K., Weir, S. T., Malba, V., & Akella, J. (2002). Structural and electrical properties of beryllium metal to 66 GPa studied using designer diamond anvils. *Physical Review B*, 65(17), 172107.

31. Vaidya, S. N., & Kennedy, G. C. (1970). Compressibility of 18 metals to 45 kbar. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 31(10), 2329-2345.

32. Hanfland, M., Loa, I., & Syassen, K. (2002). Sodium under pressure: bcc to fcc structural transition and pressure-volume relation to 100 GPa. *Physical Review B*, 65(18), 184109.

33. Guillaume, C. L., Gregoryanz, E., Degtyareva, O., McMahon, M. I., Hanfland, M., Evans, S., ... & Mao, H. K. (2011). Cold melting and solid structures of dense lithium. *Nature Physics*, 7(3), 211-214.

34. Takemura, K. (1999, July). Equation of state of V and Nb under truly hydrostatic conditions. In *Proceedings of the International Conference on High Pressure Science and Technology (AIRAPT-17)*, Honolulu, HI, USA (pp. 25-30).

35. Dewaele, A., Loubeyre, P., & Mezouar, M. (2004). Refinement of the equation of state of tantalum. *Physical Review B*, 69(9), 092106.

36. Haines, J., Leger, J. M., Pereira, A. S., Häusermann, D., & Hanfland, M. (1999). High-pressure structural phase transitions in semiconducting niobium dioxide. *Physical Review B*, 59(21), 13650.

37. Hanfland, M., Syassen, K., Fahy, S., Louie, S. G., & Cohen, M. L. (1985). Pressure dependence of the first-order Raman mode in diamond. *Physical Review B*, 31(10), 6896.

38. Aleksandrov, I. V., Goncharov, A. P., Makarenko, I. N., Zisman, A. N., Jakovenko, E. V., & Stishov, S. M. (1989). Diamond and cubic boron nitride under high pressure: Raman scattering, equation of state and high pressure scale. *International Journal of High Pressure Research*, 1(5-6), 333-336.

39. Gillet, P., Fiquet, G., Daniel, I., Reynard, B., & Hanfland, M. (1999). Equations of State of 12 C and 13 C Diamond. *Physical Review B*, 60(21), 14660.

40. McSkimin, H. J., & Andreatch Jr, P. (1972). Elastic moduli of diamond as a function of pressure and temperature. *Journal of Applied Physics*, 43(7), 2944-2948.

41. Vogelgesang R., Ramdas A.K., Rodriguez S. at al. *Phys. Rev. B* **54**, 3989-3999 (1996)

42. A. Dewaele, F. Datchi, P. Loubeyre, and M. Mezouar. High pressure–high temperature equations of state of neon and diamond. *PHYSICAL REVIEW B* **7**, 094106, 2008

43. Victor, A.C., 1962. Heat capacity of diamond at high temperatures. *The Journal of Chemical Physics*, 36(7), pp.1903-1911.

44. R. R. Reeber and K. Wang, Thermal expansion, molar volume and specific heat of diamond from 0 to 3000 K, *J. Electron. Mater.*, 1996, **25**, 63–67

45. Y. S. Touloukian and E. N. Buyco, (1977). Thermophysical Properties of Matter, TPRC Data Series, 13, 16-122
46. Stoupin, S., & Shvyd'ko, Y. V. (2011). Ultra-precise studies of the thermal expansion coefficient of diamond using backscattering x-ray diffraction. *Physical Review B*, 83(10), 104102.
47. Pavlovskii M. N. *Sov. Phys. Solid State* **13**, 741 (1971)
48. Marsh, S. P. (Ed.). (1980). *LASL shock Hugoniot data*. University of California press.
49. Knudson, M. D., Desjarlais, M. P., & Dolan, D. H. (2008). Shock-wave exploration of the high-pressure phases of carbon. *Science*, 322(5909), 1822-1825.
50. Nagao, H., Nakamura, K. G., Kondo, K., Ozaki, N., Takamatsu, K., Ono, T., ... & Otani, K. (2006). Hugoniot measurement of diamond under laser shock compression up to 2 TPa. *Physics of Plasmas*, 13(5), 052705.
51. Bradley D. E., Eggert J. H., Smith R. F. Diamond at 800 GPa. *Phys. Rev. Lett.* 102, 075503 (2009).
52. Eggert, J. H., Hicks, D. G., Celliers, P. M., Bradley, D. K., McWilliams, R. S., Jeanloz, R., ... & Collins, G. W. (2010). Melting temperature of diamond at ultrahigh pressure. *Nature Physics*, 6(1), 40-43.
53. Brygoo, S., Henry, E., Loubeyre, P., Eggert, J., Koenig, M., Loupias, B., ... & Rabec Le Gloahec, M. (2007). Laser-shock compression of diamond and evidence of a negative-slope melting curve. *Nature materials*, 6(4), 274-277.
54. Cauble, R., Perry, T. S., Bach, D. R., Budil, K. S., Hammel, B. A., Collins, G. W., ... & Woolsey, N. C. (1998). Absolute equation-of-state data in the 10–40 Mbar (1–4 TPa) regime. *Physical review letters*, 80(6), 1248.
55. Nellis, W. J., Mitchell, A. C., & McMahan, A. K. (2001). Carbon at pressures in the range 0.1–1 TPa (10 Mbar). *Journal of applied physics*, 90(2), 696-698.
56. Kraus, D., Ravasio, A., Gauthier, M., Gericke, D. O., Vorberger, J., Frydrych, S., ... & Roth, M. (2016). Nanosecond formation of diamond and lonsdaleite by shock compression of graphite. *Nature communications*, 7(1), 1-6.
57. Kenichi, T. (2004). Bulk modulus of osmium: High-pressure powder x-ray diffraction experiments under quasihydrostatic conditions. *Physical Review B*, 70(1), 012101.
58. Ocellli, F., Farber, D. L., Badro, J., Aracne, C. M., Teter, D. M., Hanfland, M., ... & Couzinet, B. (2004). Experimental evidence for a high-pressure isostructural phase transition in osmium. *Physical review letters*, 93(9), 095502.
59. Cynn, H., Klepeis, J. E., Yoo, C. S. and Young, D. A., 2002. Osmium has the lowest experimentally determined compressibility. *Physical review letters*, 88(13), p.135701.
60. Hixson, R. S. and Fritz, J. N., 1992. Shock compression of tungsten and molybdenum. *Journal of Applied Physics*, 71(4), pp.1721-1728.
61. Sevier, K. D., 1979. Atomic electron binding energies. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 24(4), pp.323-371.
62. Надыкто, Б. А., 2005. ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО СТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ И ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ, ЛАНТАНОИДОВ И АКТИНОИДОВ. *Материаловедение*, (5), pp.2-6.
63. Trunin, R. F., Medvedev, A. B., Functikov, A. I., Podurets, M. A., Simakov, G. V. and Sevast'yanov, A. G., 1989. Shock Compression of Porous Iron, Copper and Tungsten: and Their Equation of State in the Terapascal Pressure Range. *Sov. Phys. JETP*, 68(2), pp. 356-361.
64. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Под ред. Р. Ф. Трунина. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001, 446.
65. Vohra, Y. K., Duclos, S. J. and Ruoff, A. L., 1987. High-pressure x-ray diffraction studies on rhenium up to 216 GPa (2.16 Mbar). *Physical Review B*, 36(18), p.9790.
66. Yuan, V. W., Bowman, J. D., Funk, D. J., Morgan, G. L., Rabie, R. L., Ragan, C. E., ... & Stacy, H. L. (2005). Shock temperature measurement using neutron resonance spectroscopy. *Physical review letters*, 94(12), 125504.
67. Anzellini, S., Dewaele, A., Ocellli, F., Loubeyre, P. and Mezouar, M., 2014. Equation of state of rhenium and application for ultra high pressure calibration. *Journal of Applied Physics*, 115(4), p.043511.
68. Anzellini, S., Burakovsky, L., Turnbull, R., Bandiello, E. and Errandonea, D., 2021. P–V–T Equation of State of Iridium Up to 80 GPa and 3100 K. *Crystals*, 11(4), p.452.
69. Anzellini, S., Bottin, F., Bouchet, J. and Dewaele, A., 2020. Phase transitions and equation of state of zirconium under high pressure. *Physical Review B*, 102(18), p.184105.
70. Storm, C.V., McHardy, J.D., Finnegan, S.E., Pace, E. J., Stevenson, M. G., Duff, M. J., MacLeod,

S. . and McMahon, M.I., 2021. Behavior of rubidium at over eightfold static compression. *Physical Review B*, 103(22), p.224103.

71. Rech, G. L., Zorzi, J. E. and Perottoni, C. A., 2019. Equation of state of hexagonal-close-packed rhenium in the terapascal regime. *Physical Review B*, 100(17), p.174107.

72. Dewaele, A., 2019. Equations of state of simple solids (including Pb, NaCl and LiF) compressed in helium or neon in the Mbar range. *Minerals*, 9(11), p.684.

73. Anzellini, S., Errandonea, D., Cazorla, C., MacLeod, S., Monteseuro, V., Boccato, S., Bandiello, E., Anichtchenko, D. D., Popescu, C. and Bea-

vers, C. M., 2019. Thermal equation of state of ruthenium characterized by resistively heated diamond anvil cell. *Scientific Reports*, 9(1), pp.1-11.

74. Ono, S., 2022. Equation of State Determination for Rhenium Using First-Principles Molecular Dynamics Calculations and High-Pressure Experiments. *Advances in Condensed Matter Physics*, 2022.

75. Faussurier, G., Blancard, C. and Bethkenhagen, M., 2021. Carbon ionization from a quantum average-atom model up to gigabar pressures. *Physical Review E*, 104(2), p.025209.

Статья поступила в редакцию 15.12.2022

РЕЛЯТИВИСТСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ

Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто

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

Выведено новое релятивистское уравнение состояния при нулевой температуре, исходя из предположения, что все упругое (холодное) давление в твердом теле возникает в результате изменения энергии электронов атома при условии квантования их релятивистского момента импульса. Получена формула для релятивистской энергии электронов и оценена величина плотности, при которой эта энергия превышает значение $(m_n - m_p)c^2$. При этом происходит превращение протонов в нейтроны (нейтронизация протонов). Определено давление, которое в промежуточной асимптотике, $\gamma = 5/3$, в 2,1 раза ниже, чем давление вырожденного электронного газа.

Ключевые слова: уравнение состояния, релятивистский газ электронов, вырожденный электронный газ, нейтронизация протонов, эволюция звезд.

Введение

В космологии при рассмотрении динамики звезд на стадии выгорания термоядерного топлива в центральной части звезды рассматриваются очень высокие плотности вещества, достигающие до плотности внутри атомных ядер (10^{14} г·см⁻³) [1]. При рассмотрении таких плотностей обычно используется модель вырожденного электронного газа [2]. Кратко остановимся на уравнении состояния вырожденного электронного газа и на альтернативном ему уравнении состояния. Последнее основано на предположении, что упругое (холодное) давление связано с изменением энергии электронов в атомах твердого тела при условии квантования их момента импульса по Н. Бору

$$\frac{mvr}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = n\hbar.$$

В квантовой теории металлов производят искусственное разделение электронов атомов твердого тела на внутренние и внешние (валентные) электроны. Энергию и пространственное расположение внутренних электронов (так

же, как в свободном атоме) можно найти, определяя минимум энергии при условии, что момент импульса электронов принимает целочисленные (в единицах \hbar) значения.

Внешние электроны считаются вырожденными (коллективизированными или принадлежащими всем атомам металла), т. е. их состояние кардинально отличается от состояний свободного атома. Заполнение состояний этих вырожденных электронов производится в соответствии с принципом Паули: в каждой ячейке фазового пространства объемом $(2\pi\hbar)^3$ может содержаться не более двух электронов с разными направлениями спина. При таком заполнении фазового пространства электроны принимают значение кинетической энергии от нулевого значения до максимального E_F , называемого энергией Ферми.

Число состояний электрона в объеме V со значениями импульса в интервале p и $p+dp$ (с учетом двух направлений спина электрона) равно

$$2V \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Вырожденным считается электронный газ при нулевой температуре, когда заполняются состояния, начиная с нулевого импульса (и энергии) и кончая максимальным импульсом, называемым импульсом Ферми. Граничный импульс Ферми получается из уравнения

$$\int_0^{p_F} 2 \frac{V 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3} = N,$$

где V – объем, N – число электронов в объеме V , p_F – граничный импульс Ферми. Отсюда получаем

$$p_F = \hbar \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}. \quad (1)$$

Соответственно, для граничной энергии Ферми имеем

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{p_F^2}{2m} = \left(3\pi^2 \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2 \left(4\pi a_0^3 / 3 \right)^{2/3}}{2m \left(4\pi a_0^3 / 3 \right)^{2/3}} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi^2}{4\pi/3} \right)^{2/3} \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \frac{e^2 a_0}{a_0^2} = \\ &= \frac{1,8416 e^2}{a_0} \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} = \frac{1,8416 e^2}{a_0} \frac{1}{r_s^2}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\frac{e^2}{a_0} = 27,21165$ эВ – атомная единица энергии,

$V_0 = \frac{4\pi a_0^3}{3}$, $r_s = \frac{r_{WS}}{a_0}$, r_{WS} – радиус ячейки Вигнера–Зейтца. Средняя кинетическая энергия свободных электронов при этом равна

$$\begin{aligned} E &= \frac{2V \int_0^{p_F} \frac{p^2 4\pi p^2 dp}{2m(2\pi\hbar)^3}}{2V \int_0^{p_F} \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}} = \frac{\int_0^{p_F} p^4 dp}{2m \int_0^{p_F} p^2 dp} = \frac{1}{2m} \frac{3p_F^2}{5} = \\ &= \frac{3E_F}{5} = \frac{1,105 e^2}{a_0} \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} = \frac{1,105 e^2}{a_0} \frac{1}{r_s^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

В ультрарелятивистском электронном газе энергия частицы равна $\varepsilon = cp$. Средняя энергия свободных электронов в этом случае равна

$$\begin{aligned} E &= \frac{2V \int_0^{p_F} \frac{cp 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}}{2V \int_0^{p_F} \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}} = \frac{\int_0^{p_F} cp^3 dp}{\int_0^{p_F} p^2 dp} = \frac{3cp_F}{4} = \\ &= \frac{3c(3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{4\pi a_0^3 N}{3V 4\pi a_0^3} \right)^{1/3}}{4} = \\ &= \frac{3(9\pi/4)^{1/3} e^2 \hbar c \left(\frac{V_0}{V} \right)^{1/3}}{4a_0 e^2} = \frac{3(9\pi/4)^{1/3} e^2}{4\alpha a_0} \frac{a_0}{r}. \end{aligned}$$

В атомных единицах энергия равна

$$E = \frac{1,4394}{\alpha} \frac{a_0}{r} = 197,245 \frac{a_0}{r}. \quad (4)$$

В свободных атомах внешние электроны образуют связь с ионом, и их полная энергия принимает отрицательное значение. В твердом теле связь внешних электронов увеличивается за счет скрытой теплоты конденсации, что приводит к росту модуля полной энергии. В квантово-механических расчетах используются энергия кулоновского взаимодействия между заряженными частицами, а также обменное взаимодействие, связанное с антисимметрией волновых функций.

Отсутствие кулоновского взаимодействия электронов в металлах может означать жесткую связь каждого из них с ионом с образованием нейтрального атома. В этом случае точно так же нет кулоновского взаимодействия ионов разных атомных ячеек. Большая часть энергии взаимодействия электронов в твердом теле такая же, как в свободном атоме. Энергия связи атомов в металле может быть объяснена некулоновским взаимодействием электронов, аналогичным взаимодействию электронов различных электронных оболочек в свободных многоэлектронных атомах. Именно введение такого дополнительного взаимодействия позволило с высокой точностью описать многочисленные состояния свободных He-, Li-, Be-, B-, C-, N-, O-подобных ионов [3].

Рассмотрим теперь уравнение состояния альтернативное уравнению состояния вырожденного электронного газа. Рассмотрение проведем на основе атома водорода, как преобладающего по распространенности во Вселенной. Как известно, электроны в атомах подчиняются квантовым законам и образуют дискретные электронные оболочки, отвечающие различным значениям их момента импульса. Электронные переходы между квантовыми состояниями наблюдаются в горячей разре-

женной плазме и экспериментально надежно фиксируются методами атомной спектроскопии (энергия перехода с относительной точностью 10^{-4} и лучше). Рентгеновские спектры (в том числе для твердого тела) также показывают наличие электронных оболочек атомов.

При сжатии состояния атома водорода энергия электрона изменяется в соответствии с выражением:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r}.$$

Из условия квантования $mvr = n\hbar$ значение скорости равно $v = n\hbar / mr$. Отсюда

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} = \frac{n^2 \hbar^2 e^2}{2me^2 r^2} - \frac{e^2}{r} = \frac{n^2 a_0 e^2 a_0}{2r^2 a_0} - \frac{e^2 a_0}{r a_0} = \frac{n^2 e^2}{2x^2 a_0} - \frac{e^2}{x a_0} = \frac{e^2}{a_0} \left(\frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x} \right),$$

или в атомных единицах $\frac{e^2}{a_0}$

$$E = \frac{n^2}{2x^2} - \frac{1}{x}, \quad (5)$$

где $x = \frac{r}{a_0}$, r – радиус ячейки Вигнера–Зейтца,

a_0 – радиус первой боровской орбиты.

Из условия минимума энергии

$$\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{n^2}{x^3} + \frac{1}{x^2} = 0$$

получаем равновесное значение $x_e = n^2$.

В этой модели кинетическая энергия, приходящаяся на один электрон,

$$E_k = \frac{e^2}{a_0} \frac{1}{2x^2} = \frac{0,5e^2}{a_0} \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \quad (6)$$

в 2,1 раза меньше, чем в вырожденном электронном газе при сохранении аналитической зависимости от плотности (удельного объема).

Энергия (5) рассчитана на один атом. Для получения энергии в грамме водорода эту величину нужно умножить на число атомов в грамме, равное

$$N = \frac{1}{A} N_A,$$

где A – атомная масса, N_A – число Авогадро.

При нулевой температуре все атомы находятся в основном состоянии с главным квантовым числом $n=1$. Поэтому энергия одного грамма сжатого атомарного водорода равна

$$E = \frac{e^2 N_A}{a_0 A} \left(\frac{1}{2x^2} - \frac{1}{x} \right) = \frac{e^2 N_A}{a_0 A} \left(\frac{\sigma^{2/3}}{2} - \sigma^{1/3} \right), \quad (7)$$

где $\sigma = (a_0 / r_{WS})^3$ – степень сжатия атомной ячейки водорода.

Исходя из выражения (7) вычисляется упругое (холодное) давление

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = -\frac{\rho_0 \partial E}{\partial (\rho_0 / \rho)} = \frac{e^2 \rho_0 \sigma^2 N_A}{a_0 A} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\sigma^{2/3}}{2} - \sigma^{1/3} \right) = \frac{e^2 \rho_0 \sigma^2 N_A}{a_0 A} \left(\frac{\sigma^{-1/3}}{3} - \frac{\sigma^{-2/3}}{3} \right) = \frac{e^2 \rho_0 N_A}{a_0 3A} \left(\sigma^{5/3} - \sigma^{5/3} \right).$$

Модуль объемного сжатия равен:

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = \sigma \frac{\partial P}{\partial \sigma} = \frac{e^2 \rho_0 N_A}{a_0 3A} \sigma \left(\frac{5}{3} \sigma^{2/3} - \frac{4}{3} \sigma^{1/3} \right) = \frac{e^2 \rho_0 N_A}{a_0 9A} \left(5\sigma^{5/3} - 4\sigma^{4/3} \right) = B_0 \left(5\sigma^{5/3} - 4\sigma^{4/3} \right).$$

Отсюда следует

$$B_0 = \frac{e^2 \rho_0 N_A}{a_0 9A} \quad \text{и} \\ P = 3B_0 \left(\sigma^{5/3} - \sigma^{5/3} \right), \quad (8)$$

где $B_0 = B(\sigma = 1)$.

Выражение (8) выходит на асимптотику $P = 3B_0 \sigma^{5/3}$ очень медленно. Даже при значении $\sigma = 1000$ отличие асимптотики от (9) составляет 10 %. Кроме того, асимптотическое значение (8) в 2,21 раза меньше значения для вырожденного электронного газа, что связано с использованием разных физических моделей. Впрочем, в области очень высоких давлений, о которой экспериментально ничего не известно, различающиеся в два раза результаты можно считать совпадающими.

Вследствие разных физических моделей качественно различные следствия можно ожидать в задачах эволюции звезд, когда происходит нейтронизация атомов (превращение протонов в нейтроны при захвате электронов ядрами). Модель вырожденного газа применяют также к нейтронам, т. е. предполагают движение нейтронов при

нуле температуры, аналогичное движению вырожденного электронного газа. В нашей модели мы не видим физических причин движения ядер и нейтронов при нулевой температуре, и после нейтронизации протонов вклад в давление дает только тепловое движение нейтронов с температурой в момент нейтронизации, которое в вырожденном газе может быть значительно меньше упругого давления. Поэтому при нейтронизации должно резко уменьшиться давление, что приведет к гидродинамическим течениям и, возможно, к нестабильности и взрыву звезды.

Релятивистское уравнение состояния

В космологии при очень высоких плотностях (10^6-10^{15} г·см⁻³) широко используется релятивистское уравнение состояния вырожденного газа. В нашей модели также можно получить релятивистское уравнение состояния, несколько отличающееся от уравнения состояния вырожденного электронного газа.

С учетом релятивистских эффектов энергия электрона определяется выражением

$$E^2 = (mc^2)^2 + p^2 c^2,$$

где p – импульс электрона, m – его масса, c – скорость света. В релятивистском приближении импульс равен

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}},$$

где v – скорость электрона. Кинетическая энергия электрона равна

$$\begin{aligned} E_k &= mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{p^2 c^2}{m^2 c^4}} - 1 \right) = \\ &= mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{v^2}{c^2 (1 - v^2/c^2)}} - 1 \right) = \\ &= mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1 \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Используем условие квантования момента импульса электрона по Бору

$$\frac{mvr}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = n\hbar,$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – постоянная Планка, $n = 1, 2, 3, \dots$ –

целые числа. Из условия квантования получаем

$$1 - \frac{v^2}{c^2} = \frac{\alpha^2 m^2 a_0^2 r^2 c^2 v^2}{\alpha^2 n^2 \hbar^2 a_0^2 c^2} = \frac{x^2 v^2}{\alpha^2 n^2 c^2},$$

где $x = \frac{r}{a_0}$, $\alpha = \frac{1}{137,036}$ – постоянная тонкой

структуры, $\frac{\alpha^2 a_0^2 m^2 c^2}{\hbar^2} = \frac{e^4 a_0^2 m^2 c^2}{\hbar^2 c^2 \hbar^2} = 1$. Отсюда получаем

$$\begin{aligned} \frac{x^2 v^2}{\alpha^2 n^2 c^2} + \frac{v^2}{c^2} &= \frac{v^2}{c^2} \left(1 + \frac{x^2}{\alpha^2 n^2} \right) = 1 \text{ или} \\ \frac{v^2}{c^2} &= 1 / \left(1 + \frac{x^2}{\alpha^2 n^2} \right). \end{aligned}$$

Производя преобразования, получаем

$$1 - \frac{v^2}{c^2} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{x^2}{\alpha^2 n^2} \right)} = \frac{x^2 / \alpha^2 n^2}{1 + \frac{x^2}{\alpha^2 n^2}} = \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2 n^2}{x^2}}.$$

Поэтому с учетом квантования получаем для кинетической энергии электрона выражение

$$E_k = mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha^2 n^2}{x^2}} - 1 \right). \quad (10)$$

Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром равна

$$E_p = -\frac{Ze^2}{r} = \frac{Ze^2 a_0}{a_0 r} = -\frac{e^2 Z}{a_0 x},$$

Z – заряд ядра. Полная энергия $E = E_k + E_p$ (в атомных единицах)

$$E = \frac{1}{\alpha^2} \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha^2 n^2}{x^2}} - 1 \right) - \frac{Z}{x}. \quad (11)$$

Эта формула в общем случае дает выражение для энергии сжатого атома. В ультрарелятивистском пределе энергия равна

$$E = \left(\frac{n}{\alpha} - Z \right) \frac{1}{x}.$$

При сжатии основного состояния атома водорода это значение энергии в 1,45 раза меньше, чем для вырожденного электронного газа.

На рис. 1 показана зависимость логарифма полной энергии (кривая 1) и логарифма кинетической энергии (кривая 2) от десятичного логарифма

плотности для атомарного водорода в основном состоянии, рассчитанная с использованием формул (10) и (11) с $n=1$ и $Z=1$. Уменьшение наклона при большой плотности объясняется влиянием релятивистских эффектов.

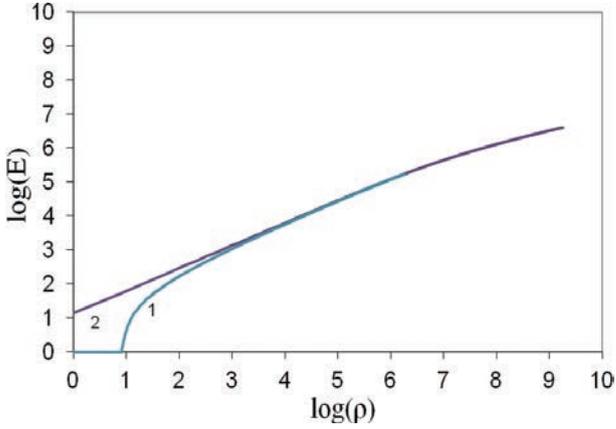


Рис. 1. Зависимость $\log(E)$ от $\log(\rho)$ для водорода: 1 – сумма кинетической и потенциальной энергии, 2 – кинетическая энергия. Энергия в электронвольтах, плотность в единицах $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$

Энергия электрона в атоме водорода больше чем $(m_n - m_p)c^2$ достигается при плотности около $10^7 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. Происходит нейтронизация протонов, и упругая энергия и давление пропадают. Поэтому при нейтронизации должно резко уменьшиться давление, что может привести к быстрым гидродинамическим течениям, нестабильности и взрыву звезды.

В состоянии равновесия энергия минимальна. Из уравнения (11) получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial x} &= \frac{1}{\alpha^2} \left[-\frac{\alpha^2 n^2}{x^3} \left(1 + \frac{\alpha^2 n^2}{x^2} \right)^{-1/2} \right] + \frac{Z}{x^2} = \\ &= -\frac{n^2}{x^3} \left(1 + \frac{\alpha^2 n^2}{x^2} \right)^{-1/2} + \frac{Z}{x^2} = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

Из уравнения (12) получаем:

$$-\frac{n^2}{Zx} \left(1 + \frac{\alpha^2 n^2}{x^2} \right)^{-1/2} + 1 = 0.$$

Отсюда

$$\frac{n^2}{Zx} = \left(1 + \frac{\alpha^2 n^2}{x^2} \right)^{1/2}$$

или

$$\frac{n^2}{x^2} \left(\frac{n^2}{Z^2} - \alpha^2 \right) = 1.$$

Следовательно, для равновесного значения параметра x_e получаем выражение

$$x_e = n \left(\frac{n^2}{Z^2} - \alpha^2 \right)^{1/2} = \frac{n^2}{Z} \left(1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \right)^{1/2}. \quad (13)$$

Соответственно, подставляя (13) в уравнение (11), получаем равновесное значение энергии

$$\begin{aligned} E_n = E &= \frac{1}{\alpha^2} \left[\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(\frac{n^2}{Z^2} - \alpha^2 \right)}} - 1 \right] - \frac{Z}{n \left(\frac{n^2}{Z^2} - \alpha^2 \right)^{1/2}} = \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \left[\frac{n}{\alpha Z \left(\frac{n^2}{Z^2 \alpha^2} - 1 \right)^{1/2}} - 1 \right] - \frac{\alpha Z}{\alpha^2 n \left(\frac{n^2}{Z^2 \alpha^2} - 1 \right)^{1/2}}, \end{aligned}$$

или после преобразований

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{1}{\alpha^2} \left[\frac{1}{\left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \right)^{1/2}} - 1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2 \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \right)^{1/2}} \right] = \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \left[\left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \right)^{1/2} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

При нулевой температуре все атомы водорода находятся в основном состоянии с главным квантовым числом $n=1$ и энергия одного грамма сжатого атомарного водорода равна

$$\begin{aligned} E &= \frac{e^2 N_A}{a_0 A} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{x^2}} - 1 \right) - \frac{1}{x} \right] = \\ &= \frac{e^2 N_A}{a_0 A} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(\sqrt{1 + \alpha^2 \sigma^{2/3}} - 1 \right) - \sigma^{1/3} \right], \end{aligned} \quad (15)$$

где $\sigma = (a_0 / r_{WS})^3$ – степень сжатия атомной ячейки водорода.

В сжатом атоме при сохранении квантового состояния давление при $T=0$, упругое (холодное) давление вычисляется исходя из выражения (15):

$$\begin{aligned}
 P &= -\frac{\partial E}{\partial V} = -\frac{\rho_0 \partial E}{\partial(\rho_0 / \rho)} = \\
 &= \frac{e^2 \rho_0 \sigma^2 N_A}{a_0 A} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(\sqrt{1 + \alpha^2 \sigma^{2/3}} - 1 \right) - \sigma^{1/3} \right] = \\
 &= \frac{e^2 \rho_0 \sigma^2 N_A}{a_0 A} \left(\frac{2\alpha^2 \sigma^{-1/3}}{2\alpha^2 3\sqrt{1 + \alpha^2 \sigma^{2/3}}} - \frac{\sigma^{-2/3}}{3} \right) = \\
 &= 3B_0 \left(\sigma^{5/3} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{2/3} \right)^{-1/2} - \sigma^{4/3} \right) \quad (16)
 \end{aligned}$$

От нерелятивистского приближения (8) выражение (16) отличается только дополнительным множителем в первом члене.

На рис. 2. показана зависимость $\log(P)$ от $\log(\rho)$ по уравнениям состояния (8) и (16). Данные (8) и (16) совпадают до $\sigma = 10^6$, при большей плотности в релятивистском приближении получается меньшее давление (примерно в 10 раз при $10^9 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$). На этом же рисунке показано давление в нерелятивистском вырожденном электронном газе. Асимптотическое значение в 2,21 раза выше, чем по уравнению (16). Выход на асимптотику происходит очень медленно. При плотности водорода примерно $100 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ давление в вырожденном электронном газе в 7 раз выше, чем по уравнению (16). При плотности $10^4 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ давление в вырожденном электронном газе в 2,5 раза выше, чем по уравнению (16).

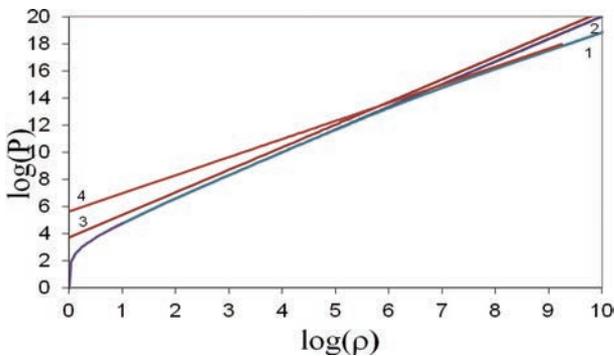


Рис. 2. Зависимость $\log(P)$ от $\log(\rho)$ в водороде: 1 – расчет давления в релятивистском приближении, 2 – нерелятивистский расчет, 3 – давление в нерелятивистском вырожденном электронном газе, 4 – давление в ультра-релятивистском вырожденном электронном газе. Давление в ГПа, плотность в единицах $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$. Релятивистское приближение отличается от нерелятивистского, начиная с плотности $10^6 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$

Показатель адиабаты релятивистского уравнения состояния

Определим показатель адиабаты γ в зависимости от плотности:

$$\frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} = \frac{\rho}{P} \frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{\sigma}{P} \frac{\partial P}{\partial \sigma}.$$

Производная $\frac{\partial P}{\partial \sigma}$ равна:

$$\frac{\partial P}{\partial \sigma} = 3B_0 \left[\frac{5}{3} \sigma^{\frac{2}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-1/2} - \frac{1}{3} \alpha^2 \sigma^{\frac{4}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-3/2} - \frac{4}{3} \sigma^{\frac{1}{3}} \right]. \quad (17)$$

С учетом (16) и (17) для γ получаем выражение

$$\begin{aligned}
 \gamma &= \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} = \frac{\sigma}{P} \frac{\partial P}{\partial \sigma} = \\
 &= \frac{\sigma \left[\frac{5}{3} \sigma^{\frac{2}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-1/2} - \frac{1}{3} \alpha^2 \sigma^{\frac{4}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-3/2} - \frac{4}{3} \sigma^{\frac{1}{3}} \right]}{\sigma^{\frac{5}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-1/2} - \sigma^{\frac{4}{3}}}.
 \end{aligned}$$

Отсюда для показателя адиабаты γ окончательно получаем:

$$\begin{aligned}
 \gamma &= \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} = \\
 &= \frac{\frac{5}{3} \sigma^{\frac{2}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-1/2} - \frac{1}{3} \alpha^2 \sigma^{\frac{4}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-3/2} - \frac{4}{3} \sigma^{\frac{1}{3}}}{\sigma^{\frac{2}{3}} \left(1 + \alpha^2 \sigma^{\frac{2}{3}} \right)^{-1/2} - \frac{1}{\sigma^{\frac{1}{3}}}}. \quad (18)
 \end{aligned}$$

На рис. 3 показана зависимость $\gamma(\rho)$, рассчитанная по формуле (18). Вблизи нормальной плотности показатель адиабаты очень высокий ($\gamma = 12$ при $\sigma = 1,1$). Выход на промежуточную асимптотику $\gamma = 5/3$ происходит на интервале $\sigma = 10^2 \div 10^3$, при большей степени сжатия происходит падение $\gamma(\sigma)$ и выход на асимптотику $\gamma = 4/3$ при $\sigma = 10^9$. При $\sigma > 10^5$ зависимость $\gamma(\sigma)$, полученная для релятивистского вырожденного электронного газа близка к нашей расчетной кривой.

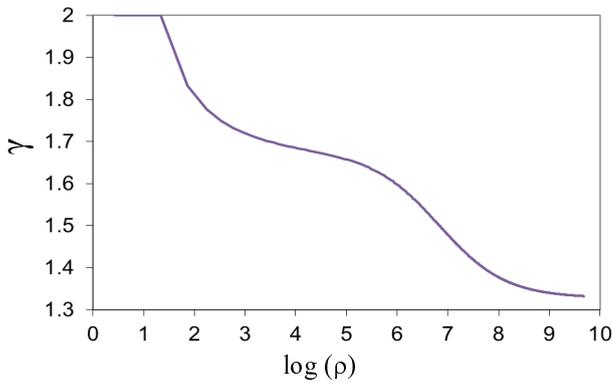


Рис. 3. Зависимость показателя адиабаты водорода $\gamma(\rho)$ от логарифма плотности в единицах $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$

Электронная статистическая сумма для релятивистского газа

При ограниченном объеме, приходящемся на атом водорода, энергия электрона в квантовом состоянии с главным квантовым числом n равна

$$E_n = \frac{1}{\alpha^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right) - \frac{1}{x} = \frac{1}{\alpha^2} \left(\left(1 + \alpha^2 n^2 \sigma^{2/3} \right)^{1/2} - 1 \right) - \sigma^{1/3}, \quad (19)$$

где $\sigma = \frac{4\pi a_0^3}{3V}$ – отношение начального объема атома к объему сжатого атома V . Тогда с учетом релятивистских эффектов статистическая сумма, равная

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} 2n^2 e^{-\frac{E_n}{kT}}, \quad (20)$$

как и в нерелятивистском случае [4], конечна, зависит от температуры и объема и может использоваться для вычисления термодинамических параметров атомарного водорода.

При $x > n^2$ энергия совпадает с энергией

свободного атома $E_n = \frac{1}{\alpha^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right)$ и не за-

висит от объема. Если $x < n^2$, энергия определяется из выражения для сжатого атома (19), и статистическая сумма (20) позволяет вычислить все термодинамические характеристики водорода. Релятивистские эффекты в горячей водородной плазме начинают проявляться с температуры 100 кэВ.

Заключение

1. Получено новое релятивистское уравнение состояния холодного водорода.
2. Определен показатель адиабаты в зависимости от плотности с выходом на значение $4/3$ в ультрарелятивистском пределе.
3. Согласно представленной модели при нейтронизации протонов упругая энергия и давление принимают нулевые значения. Поэтому при нейтронизации должно резко уменьшиться полное давление, что может привести к быстрым гидродинамическим течениям, нестабильности и взрыву звезды.
4. Показана возможность вычислить все термодинамические характеристики релятивистской горячей водородной плазмы, исходя из статистической суммы.

Список литературы

1. Зельдович Я. Б., & Новиков И. Д. (1967). *Релятивистская астрофизика*. Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Статистическая физика. Часть 1*. М.: Наука. 1976.
3. Надыкто Б. А. Полуэмпирическая модель расчета энергий состояний многоэлектронных атомов и ионов. 1993. *Успехи физических наук*. **163** (9), 37–74
4. Надыкто, Б.А. О статической сумме и уравнении состояния водородной плазмы. 1997. *Доклады академии наук*. 355, 6, 754.

Статья поступила в редакцию 20.12.2022

Надыкто Б. А., Надыкто О. Б., Надыкто А. Б. Расчет термодинамических характеристик водорода исходя из статистической суммы	3	Nadykto B. A., Nadykto O. B., Nadykto A. B. Hydrogen thermodynamic characteristics from statistic sum	3
Надыкто Б. А., Надыкто О. Б., Надыкто А. Б. Электронные фазовые переходы в сжатых твердых телах и новые шкалы давления для снижения неопределенности при калибровке давления	21	Nadykto B. A., Nadykto O. B., Nadykto A. B. Electronic phase transitions in compressed solids and new pressure scales to reduce uncertainty in pressure calibration	21
Надыкто Б. А., Надыкто О. Б., Надыкто А. Б. Релятивистское уравнение состояния	38	Nadykto B. A., Nadykto O. B., Nadykto A. B. Relativistic equation of states	38

Редактор *Н. П. Мишкина*

Компьютерная подготовка оригинала-макета *Н. В. Мишкина*

Подписано в печать 03.02.2023 Формат 60 × 84 1/8

Усл. печ. л. ~7,0 Уч.-изд. л. ~5,5

Тираж 1000 экз. Зак. тип. 439-2023 3 статьи Индекс 72246

Отпечатано в ИПЦ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

607188, г. Саров Нижегородской области,

ул. Силкина, 23

РЕФЕРАТЫ

УДК 536.75; 533.9.01

Расчет термодинамических характеристик водорода исходя из статистической суммы / Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2022. Вып. 3. С. 3–20.

Термодинамические свойства различных изотопов водорода в экстремальных условиях критически важны для физики плазмы, включая термоядерный синтез с инерционным удержанием (ICF), и астрофизики, включая теплое плотное вещество (WDM). Основная проблема при расчете термодинамических свойств водородной плазмы состоит в том, что ее статистическая сумма (СС) с энергетическими уровнями свободных атомов H расходитя. Здесь мы показываем, что СС атомов H с уровнями энергии, учитывающими конечный размер атомной ячейки в экстремальных условиях, сходится и, таким образом, может использоваться для прямых вычислений соответствующих термодинамических функций с очень низкими вычислительными затратами. Конечная СС была использована для получения универсального уравнения состояния (УРС) водорода в широком диапазоне параметров. Получено УРС, которое адекватно описывает состояние водорода во всем диапазоне плотностей и температур, включая холодную кривую. Показано, что новый УРС хорошо согласуется с имеющимися измерениями и расчетами, выполненными с использованием самых современных вариантов теории функций плотности (DFT) и квантовых методов Монте-Карло. Это означает, что новый подход представляет собой жизнеспособную альтернативу вышеупомянутым традиционным методам, вычислительные затраты которых во многих случаях непомерно высоки. Поскольку сходящаяся СС и соответствующие термодинамические функции были выведены в аналитической форме, полученные формулы могут использоваться при моделировании множества процессов и систем, играющих важную роль в физике плазмы и астрофизике, включая ICF и WDM.

УДК 539.89; 539.58

Электронные фазовые переходы в сжатых твердых телах и новые шкалы давления для снижения неопределенности при калибровке давления / Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2022. Вып. 3. С. 21–37.

Показано, что безразмерное уравнение состояния (УРС) для холодного давления $P/3B_0 = \left(\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3} \right)$, где B – модуль объемного сжатия, ρ – плотность, $\sigma = \rho/\rho_0$ – степень сжатия, а индекс 0 относится к свойствам материала при нулевой температуре $T = 0$ К и давлении $P = 0$ ГПа, является универсальным и адекватно описывает сжатие металлов, диэлектриков и соединений. Предложено и оценено по экспериментальным данным новое холодное УРС для алмаза с $\rho_0 = 3,515 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ и $B_0 = 442$ ГПа. Тщательная оценка нового уравнения состояния показывает, что оно хорошо согласуется с экспериментами по статическому и ударному сжатию при давлениях до 1400 ГПа. Таким образом, оно может использоваться в качестве новой алмазной шкалы давления, где плотность алмаза и исследуемого материала измеряется с помощью рентгеновской дифракции, а $P(\rho)$ выражается через EOS алмаза. Разработана новая рубиновая шкала давления

$$P = \frac{1904}{7,2} \left(\left(1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^{7,2} - 1 \right), \text{ где } \lambda_0 = 694,24 \text{ – длина волны линии флуоресценции рубина } R1, \text{ а } \Delta\lambda = \Delta\lambda(\rho) \text{ – сдвиг линии при сжатии.}$$

Релятивистское уравнение состояния / Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2022. Вып. 3. С. 38-44.

Выведено новое релятивистское уравнение состояния при нулевой температуре, исходя из предположения, что все упругое (холодное) давление в твердом теле возникает в результате изменения энергии электронов атома при условии квантования их релятивистского момента импульса. Получена формула для релятивистской энергии электронов и оценена величина плотности, при которой эта энергия превышает значение $(m_n - m_p)c^2$. При этом происходит превращение протонов в нейтроны (нейтронизация протонов). Определено давление, которое в промежуточной асимптотике, $\gamma = 5/3$, в 2,1 раза ниже, чем давление вырожденного электронного газа.

ABSTRACT

Hydrogen thermodynamic characteristics from statistic sum / B. A. Nadykto, O. B. Nadykto, A. B. Nadykto // VANT. Ser.: Teoret. i prikl. fizika. 2022, N 3. P. 3–20.

Thermodynamic properties of different isotopes of hydrogen under extreme conditions are critically important for physics of plasmas and astrophysics, including Inertial Confinement Fusion (ICF) and Warm Dense Matter (WDM). The main problem in calculating thermodynamic properties of hydrogen plasma is that its statistical sum (STS) with energy levels of free H atoms diverges. Here, we show that the STS of hydrogen atoms with the energy levels accounting for the finite size of the atomic cell converges, and, thus, can be used for direct calculations of the corresponding thermodynamic functions at very low computational costs. The convergent STS has been employed to derive a universal wide-range Equation of State (EoS) of hydrogen, which adequately describes its state over the full range of densities and temperatures, and is shown to agree well with available measurements and calculations carried out using the latest updated versions of the Density Functional Theory (DFT) and quantum Monte Carlo methods. This means the new approach is a viable low-cost alternative to the above-mentioned conventional methods, whose computational costs are, in many cases, prohibitively high. Since the convergent STS and the corresponding thermodynamic functions are available in a closed analytical form, they can be used in modeling a variety of processes and systems playing an important role in plasma physics and astrophysics, ICF and WDM.

Electronic phase transitions in compressed solids and new pressure scales to reduce uncertainty in pressure calibration / B. A. Nadykto, O. B. Nadykto, A. B. Nadykto // VANT. Ser.: Teoret. i prikl. fizika. 2022, N 3. P. 21–37.

It is shown that the dimensionless equation of state (EOS) for cold pressure $P/3B_0 = (\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3})$, where B is the bulk modulus, ρ is the density, $\sigma = \rho/\rho_0$ is the degree of compression, and index 0 refers to the properties of the material at zero temperature $T = 0$ K and pressure $P = 0$ GPa, is universal and adequately describes the compression of various metals, dielectrics, and compounds. A new cold EoS for diamond with $\rho_0 = 3,515 \text{ g cm}^{-3}$ and $B_0 = 442$ GPa has been proposed and validated against experimental data. A careful evaluation of the new equation of state shows that it agrees well with experiments on the static and shock compression at pressures up to 1400 GPa. Thus, it can be used as a new diamond pressure scale, where the density of diamond and test material is measured by X-ray diffraction and is expressed in terms of the diamond EoS.

A new ruby pressure scale $P = \frac{1904}{7,2} \left(\left(1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^{7,2} - 1 \right)$, where $\lambda_0 = 694.24$ is the

wavelength of the ruby R1 fluorescence line and $\Delta\lambda = \Delta\lambda(\rho)$ is the line shift upon compression, has been developed.

Relativistic equation of state / B. A. Nadykto, O. B. Nadykto, A. B. Nadykto // VANT. Ser.: Teoret. i prikl. fizika. 2022, N 2. P. 38-44.

A new relativistic equation of state at zero temperature is derived based on the assumption that all the elastic (cold) pressure in a solid arises as a result of a change in the energy of the electrons of an atom under the condition of quantization of their relativistic angular momentum. A formula was obtained for the relativistic energy of electrons and the density value at which this energy exceeds $(m_n - m_p)c^2$ was estimated. In this case, the transformation of protons into neutrons (neutronization of protons) occurs. The pressure is determined, which in the intermediate asymptotics $\gamma = 5/3$ is 2.1 times lower than the pressure of the degenerate electron gas.

ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ СТАТЕЙ

К авторским оригиналам, передаваемым для издания, предъявляются следующие требования:

1. Экземпляр статьи должен быть отпечатан на одной стороне листа формата А4 шрифтом Times New Roman 12 пунктов через 2 интервала, левое поле 3 см. Статья сопровождается электронным вариантом текста (шрифт 11 пунктов через 1 интервал) в редакторе Word for Windows версии 2003. Статья должна быть составлена в следующем порядке: УДК; название статьи; инициалы и фамилии авторов; аннотация (не более 10 строк); ключевые слова – все вышеперечисленное на русском и английском языках; текст; список литературы; пронумерованные рисунки и подписи (на отдельном листе); таблицы с нумерационным и тематическим заголовками, каждая таблица на отдельном листе, а в электронном виде представляется отдельным файлом. Кавычки в тексте ставятся при английской раскладке клавиатуры («...»). Название файла должно состоять из фамилии первого автора и краткого названия статьи.

2. Файлы иллюстраций должны быть представлены отдельно – в виде файлов, в формате TIFF (.TIF) или JPEG (.JPG) (максимальное качество) с разрешением не менее 250 точек на дюйм (dpi или inch). Название файла иллюстрации должно включать фамилию первого автора и порядковый номер рисунка в статье, например: Dzyuba_03.tif. Не допускается представлять иллюстрации, созданные с использованием внутренних инструментов Word.

3. При написании статьи следует использовать общепринятые термины, единицы измерения и условные обозначения. Все употребляемые авторами обозначения должны быть определены при их первом появлении в тексте. Необходимо обращать внимание на написание прописных и строчных букв: латинские буквы (*A, I, d, h* и т. п.) набираются курсивом, греческие буквы (α, β, γ), названия функций (\sin, \cos, \exp), химических элементов (H_2O, H_2C_5OH) и единиц измерения (см, МВт/см², с) – прямым (обычным) шрифтом. Символы ($\Re, \varnothing, \otimes \in$ и т. п.) следует оговаривать на полях рукописи. Обозначения матриц и векторов набираются полужирным шрифтом прямо.

4. Формулы создаются в виде целых математических выражений в формульном редакторе Word или редакторе Math Type и нумеруются в круглых скобках. Нумерация формул должна быть сплошной по статье (не по разделам), нумерация типа (2а), (2б) нежелательна. Нумеровать следует только те формулы и уравнения, на которые есть ссылка в последующем изложении.

5. Ссылки на литературу в тексте даются по порядку, арабскими цифрами в квадратных скобках. Список литературы составляется в той же последовательности, в которой приводятся ссылки на литературу в тексте. Библиографические ссылки оформляются по следующим правилам:

– для книг: фамилии и инициалы авторов, название книги, место издания, издательство (без кавычек), год (для трудов конференций – город, страна, год);

– для статей в журнале: фамилии и инициалы авторов, название статьи, название журнала (без кавычек), год, том, выпуск, страницы;

– для авторефератов диссертаций: фамилия и инициалы автора, название автореферата диссертации, степень, место защиты (город) и год;

– для препринтов: фамилии и инициалы авторов, название препринта, место издания, год и номер;

– для патентов: вид патентного документа (А.с. или Пат.), его номер, название страны, выдавшей документ, индекс международной классификации изобретения, название издания, в котором опубликована формула изобретения, год и номер издания;

– для электронных источников – полный электронный адрес (включая дату обращения к источнику), позволяющий обратиться к публикации.

При необходимости в заголовке библиографической ссылки на работу четырех и более авторов могут быть указаны имена всех авторов или первых трех с добавлением слов «и др.». В списке литературы инициалы должны стоять после фамилий.

6. В конце текста (перед списком литературы) указывается контактная информация обо всех авторах статьи: фамилия, имя, отчество (полностью), место работы, должность, телефон, e-mail и по желанию автора – домашний почтовый адрес.

Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188, г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, ИТМФ, в редакцию журнала ВАНТ, сер. «Теоретическая и прикладная физика». Тел. (83 130) 2-77-01. E-mail: Nadykto@vniief.ru