

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
(ОИВТ РАН)

На правах рукописи

Кадатский Максим Алексеевич

**КВАНТОВО-СТАТИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОСТЫХ
ВЕЩЕСТВ И СМЕСЕЙ ПРИ ВЫСОКИХ
ПЛОТНОСТЯХ ЭНЕРГИИ**

Специальность 01.04.08 —

«Физика плазмы»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

к. ф.-м. н.

Хищенко Константин Владимирович

Москва — 2019

Оглавление

	Стр.
Список сокращений и условных обозначений	4
Введение	6
Обзор литературы	14
Глава 1. Используемые модели и алгоритм расчёта	
термодинамических функций	26
1.1 Модели расчёта электронной составляющей уравнения состояния	26
1.1.1 Модель Томаса–Ферми	27
1.1.2 Модель Томаса–Ферми с квантовой и обменной поправками	28
1.1.3 Модель Хартри–Фока–Слэтера	29
1.2 Модели расчёта ионной составляющей уравнения состояния . . .	38
1.3 Алгоритм расчёта самосогласованных потенциалов для смеси химических элементов	40
Глава 2. Результаты расчётов термодинамических	
зависимостей	45
2.1 Электронная теплоёмкость металлов	45
2.2 Ударные адиабаты сплошных и пористых образцов металлов и смесей	49
2.2.1 Алюминий	51
2.2.2 Железо	57
2.2.3 Медь	60
2.2.4 Молибден	63
2.2.5 Диоксид кремния	66

	Стр.	
2.3	Изоэнтропическая разгрузка ударно-сжатых образцов	70
2.4	Интерпретация относительных измерений сжимаемости в сильных ударных волнах	75
Заключение		87
Приложение А. Ударные адиабаты металлов, рассчитанные по модели Хартри–Фока–Слэтера с учётом ионного вклада по модели заряженных твёрдых сфер		89
Приложение Б. Ударные адиабаты диоксида кремния в формах кварца и стишовита, рассчитанные по модели Хартри–Фока–Слэтера с учётом ионного вклада по модели идеального газа		92
Приложение В. Интерпретация данных относительных измерений ударной сжимаемости сплошных образцов алюминия в сильных ударных волнах		94
Список литературы		96

Список сокращений и условных обозначений

- ТФ — обобщённая модель Томаса–Ферми;
- ТФП — модель Томаса–Ферми с квантовой и обменной поправками;
- ХФС — модель Хартри–Фока–Слэтера;
- КСМ — квантово-статистическая модель;
- КМД — метод квантовой молекулярной динамики;
- ИГ — модель идеального больцмановского газа;
- ОКП — модель однокомпонентной плазмы;
- ЗТС — модель заряженных твёрдых сфер;
- УРС — уравнение состояния;
- Z — заряд ядра атома;
- A_u — атомная масса;
- Z_0 — заряд свободных электронов;
- r_0 — радиус атомной ячейки;
- θ — электронная температура в единицах энергии Хартри E_H ;
- μ — химический потенциал;
- $V(r)$ — радиальная зависимость самосогласованного атомного потенциала;
- $\Phi(r) = \frac{V(r)+\mu}{\theta}$ — радиальная зависимость приведённого атомного потенциала;
- $\rho_e(r)$ — радиальная зависимость электронной плотности;
- P_e, P_i — давление электронной и ионной подсистем;
- E_e, E_i — энергия электронной и ионной подсистем;
- C_V^{el}, C_P^{el} — теплоёмкость электронной подсистемы при постоянном объёме (V) и давлении (P).

Здесь и далее по тексту, если не оговорено иное, физические величины выражены в атомной системе единиц, в которой элементарный электрический заряд e , масса электрона m_e и постоянная планка \hbar приравнены к единице.

Введение

Диссертация посвящена теоретическому исследованию термодинамических свойств металлов и соединений сложного химического состава в широкой области температур и плотностей, в том числе в плазменной области фазовой диаграммы. Для расчёта термодинамических свойств в работе применяются квантово-статистические модели среднего атома, а именно модели Томаса–Ферми (ТФ), Томаса–Ферми с поправками (ТФП) и Хартри–Фока–Слэтера (ХФС). С помощью перечисленных моделей проведены широкодиапазонные расчёты электронной теплоёмкости плазмы алюминия и молибдена при нормальной плотности вещества; по модели ХФС с учётом ионной подсистемы по моделям идеального газа Больцмана (ИГ) и заряженных твёрдых сфер (ЗТС) рассчитаны ударно-волновые зависимости для сплошных и пористых образцов алюминия, железа, меди, молибдена и диоксида кремния [1–27].

Актуальность темы. В последние годы идёт активное экспериментальное и теоретическое исследование процессов, в которых происходит переход вещества в состояния с высокими плотностями энергии (с характерным значением превышающим 10^{11} Дж/м³). В частности, эти состояния могут быть получены в экспериментах с использованием генераторов сильных ударных волн, магнитным ускорением металлических ударников, воздействием интенсивных лазерных импульсов, взрывом металлических проводников в X- и Z-пинчах. Кроме того, до принятия в 1996 году Генеральной Ассамблеей ООН договора о всеобъемлющем запрещении ядерных испытаний, был накоплен большой массив экспериментальных данных полученных с использованием подземных ядерных взрывов.

Для проведения численного моделирования этих и других физических процессов, в частности, с использованием методов вычислительной гидродинамики, необходимо знание уравнения состояния исследуемого вещества. Уравнение состояния является фундаментальной характеристикой связыва-

ющей друг с другом термодинамические параметры равновесных систем, а именно температуру, плотность, давление и внутреннюю энергию.

Для построения уравнения состояния вещества в широком диапазоне температур и плотностей успешно применяется квантово-статистический подход. В рамках этого подхода отдельный интерес для описания веществ в состояниях с высокой плотностью энергии представляют ячеечные модели среднего атома, использующие приближение самосогласованного поля. Эти модели относительно просты в реализации и не требуют больших вычислительных затрат. При этом применение приближений этих моделей тем более оправдано, чем выше температура и плотность вещества. В связи с этим, в настоящее время продолжают исследования связанные с изучением возможности применения этих моделей для описания поведения широкого класса веществ в различных областях фазовой диаграммы. Кроме того, в рамках этих исследований проводится усовершенствование ранее предложенных моделей и идёт разработка новых.

Одной из ранее разработанных моделей среднего атома является модель ХФС. Эта модель достаточно широко используется для расчёта термодинамических параметров простых веществ при относительно высоких температурах и близких к нормальным плотностям (область горячей плотной плазмы). Но при проведении широкодиапазонных расчётов ранее представленные реализации этой модели либо давали скачки термодинамических функций, связанные с переходом состояний электронов между дискретным и непрерывным спектром, либо требовали ввода дополнительного свободного параметра, отвечающего за способ выбора значений энергетической границы состояний электронов отнесённых к непрерывному спектру в конкретной области входных термодинамических параметров. В частности, в работе [28] таким параметром было значение номера корня уравнения, отвечающего за сохранение числа рассматриваемых состояний, которое для каждого конкретного элемента выбиралось из физических соображений и примерно соответствовало числу электронных оболочек в атоме в нормальном состоянии ($T = 0$, $\rho = \rho_0$). Помимо этой про-

блемы, также актуален более общий вопрос о границе области применимости моделей среднего атома.

В настоящей работе предложено реализовать вариант модели ХФС, для которого при проведении широкодиапазонных расчётов уравнения состояния не требуется дополнительных свободных параметров, но при этом полученные термодинамические зависимости остаются непрерывными. Далее, на основе сравнения результатов этих расчётов с экспериментальными данными проводится оценка области применимости полученной реализации модели.

Отдельной задачей является квантово-статистический расчет термодинамических свойств веществ сложного химического состава (соединения, сплавы и прочие смеси), что имеет важное практическое значение, поскольку вещества этих классов широко применяются в качестве материалов различного назначения, в том числе использующихся при интенсивных силовых и тепловых нагрузках. Ранее, для расчетов свойств смесей в рамках ячеечного приближения были предложены методы [29] согласования химических потенциалов компонент смеси. В настоящей работе один из этих методов применяется к расчётам по реализованной версии модели ХФС.

Постановка экспериментов для получения данных о свойствах вещества в области горячей плотной плазмы связана с различными трудностями, и в некоторых случаях единственным способом получить информацию о поведении веществ в этой области является проведение численного моделирования. Тем самым, используя модель ХФС, можно получить новую информацию по термодинамическим свойствам ряда веществ.

Цель диссертационной работы состоит в получении новой теоретической информации о термодинамических свойствах простых веществ и смесей в области состояний плотной плазмы на основе квантово-статистических моделей среднего атома.

Для достижения цели были решены следующие задачи:

1. Была разработана программа, которая для заданной температуры, плотности и состава вещества рассчитывает электронное давление и

энергию по моделям ТФ, ТФП и ХФС, а ионное давление и энергию по моделям ИГ и ЗТС. При этом модель ХФС была реализована в двух вариантах. А именно, сначала был реализован вариант с использованием заранее заданного значения отнесенных к непрерывному спектру электронных состояний, с помощью которого была отлажена программа и повторены результаты других авторов. Затем был реализован вариант с автоматически определяемым значением для количества этих состояний, с помощью которого в дальнейшем проводились широкодиапазонные расчёты.

2. С помощью этой программы по двум вариантам модели ХФС были рассчитаны теплоёмкостные свойства электронной подсистемы референтного вещества (алюминия). Проведено сравнение полученных зависимостей с результатами по моделям ТФ и ТФП, а также с другими доступными расчётами. По модели ХФС для широкого диапазона температур при нормальной плотности получены новые расчётные данные по электронной теплоёмкости молибдена.
3. По моделям ТФП и ХФС (с ионным вкладом по моделям ИГ и ЗТС) рассчитаны ударно-волновые зависимости для различных веществ. Проведено сравнение результатов расчётов с доступными экспериментальными данными. На основе этого сравнения дана оценка области применимости использованных моделей.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Впервые проведены широкодиапазонные расчёты уравнения состояния алюминия, меди, железа, молибдена и диоксида кремния по версии модели ХФС, в которой учитывается зонная структура для всех значимых состояний электронов с высокой энергией, а число отнесенных к дискретному и промежуточному спектру состояний подбирается автоматически.
2. Впервые по модели ХФС проведён широкодиапазонный (при температурах $T = 10^{-1}-10^4$ эВ) расчёт значений электронных теплоёмкостей

алюминия (с плотностью $\rho = 2.712 \text{ г/см}^3$) и молибдена ($\rho = 10.22 \text{ г/см}^3$).

3. Впервые по модели ХФС с учётом вклада ионной подсистемы по модели ЗТС рассчитаны изоэнтропы разгрузки алюминия и молибдена.
4. Впервые по модели ХФС с учётом вклада ионной подсистемы по модели ИГ рассчитаны ударные адиабаты диоксида кремния в модификациях кварца и стишовита.
5. Впервые показано влияние оболочечных эффектов на характер зависимости относительного изменения скорости фронта ударных волн при прохождении границы раздела двух веществ.

Практическая и научная значимость работы состоит в следующем:

1. Разработанный алгоритм расчёта термодинамических зависимостей позволяет получить новую информацию об уравнении состояния различных веществ в области горячей плотной плазмы, знание которого необходимо при моделировании различных теплофизических процессов.
2. Рассчитанные значения изохорической электронной теплоёмкости алюминия и молибдена могут помочь дать оценку электронной температуры, получаемой в экспериментах по изучению взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом.
3. Предложенные аппроксимации ударных адиабат алюминия, железа, меди и молибдена могут быть использованы для интерпретации экспериментов, где перечисленные вещества используются в качестве эталонов.
4. Рассчитанные зависимости относительного изменения скорости фронта ударных волн при прохождении границы раздела двух веществ позволяют локализовать область параметров, где можно экспериментально подтвердить наличие наблюдаемых в теории осцилляций.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Изохорическая и изобарическая теплоёмкости электронной подсистемы Al ($\rho = 2.712 \text{ г/см}^3$) и Mo ($\rho = 10.22 \text{ г/см}^3$) для температур от 0.1 до 10^4 эВ, рассчитанные по модели ХФС.
2. Ударные адиабаты сплошных и пористых образцов Al, Fe, Cu, Mo и SiO₂ в диапазоне давлений от 100 до 10^7 ГПа, рассчитанные по варианту модели ХФС, в котором автоматически определяется число состояний образующих зонную структуру электронов, с учётом вклада ионной подсистемы по моделям ИГ (для простых веществ и соединений) и ЗТС (для простых веществ).
3. Рекомендованные к использованию в качестве ударно-волновых эталонов аппроксимации ударных адиабат Al, Fe, Cu и Mo, полученные на основе модели ХФС с учётом вклада ионной подсистемы по модели ЗТС и экспериментальных данных других авторов по абсолютным измерениям ударной сжимаемости.
4. Теоретические зависимости отношения скоростей фронта сильных ударных волн на границе раздела Fe–Al, Mo–Al, SiO₂–Al, Al–Mo, Fe–Mo и Pb–Cu, рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом вклада ионной подсистемы по моделям ИГ и ЗТС.
5. Интерпретация экспериментальных данных других авторов по относительным измерениям сжимаемости Al в сильных ударных волнах с использованием эталонов из Fe и Mo, проведённая с помощью модели ХФС с учётом вклада ионной подсистемы по модели ЗТС.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на 56-й научной конференции Московского физико-технического института (МФТИ) (Россия, Москва, 2013); XXIX International Conference on Equations of State for Matter (Россия, Эльбрус, 2014); XV международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование» (Россия, Саров, 2014); XIV Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ (Россия,

Казань, 2014); XII международной конференции «Забабахинские научные чтения» (Россия, Снежинск, 2014); 57-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2014); XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Россия, Эльбрус, 2015); VIII International Conference on Plasma Physics and Plasma Technology (Минск, Республика Беларусь, 2015); Научно-координационной сессии «Исследования неидеальной плазмы» (Россия, Москва, 2015); 5th International Conference on High Energy Density Physics (США, Сан-Диего, 2015); 58-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2015); международной конференции XVII Харитоновские тематические научные чтения «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» (Россия, Саров, 2015); IX конференции «Физика сильно сжатого вещества» (Россия, Троицк, 2015); XXXI International Conference on Equations of State for Matter (Россия, Эльбрус, 2016); XV международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование» (Россия, Саров, 2016); международной конференции XVIII Харитоновские тематические научные чтения по проблемам физики высоких плотностей энергии (Россия, Саров, 2016); 59-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2016); Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics 2017 (Россия, Москва, 2017); XXXII International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Россия, Эльбрус, 2017); XIII международной конференции «Забабахинские научные чтения» (Россия, Снежинск, 2017); 60-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2017); международной конференции XIX Харитоновские тематические научные чтения «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» (Россия, Саров, 2017); XXXIII International Conference on Equations of State for Matter (Россия, Эльбрус, 2018); 16th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (Франция, Сен-Мало, 2018); Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics 2018 (Россия, Москва, 2018); 61-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2018); XXXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Россия, Эльбрус, 2019); меж-

дународной конференции XXI Харитоновские тематические научные чтения «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» (Россия, Саратов, 2019).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 27 печатных изданиях, 6 из которых — статьи в журналах, рекомендованных ВАК [1—6], 21 — тезисы докладов [7—27].

Личный вклад. Программа для расчёта по моделям ТФ, ТФП и ХФС была написана лично автором. Все произведённые по этой программе расчёты были осуществлены лично автором. Интерпретация полученных результатов была проведена лично автором. Полученные результаты были опубликованы совместно с соавторами, при этом вклад автора был определяющим. Также на основе проведённых исследований и теоретического анализа полученных результатов автором были сформулированы и обоснованы выводы и положения, вошедшие в диссертацию.

Объём и структура работы. Диссертация состоит из списка сокращений, введения, обзора литературы, 2 глав, заключения, 3 приложений и списка литературы. Полный объём диссертации составляет 120 страниц, включая 35 рисунков и 19 таблиц. Список литературы содержит 199 наименований.

Обзор литературы

На протяжении 20-го века для решения задачи определения термодинамических и других свойств веществ в широкой области фазовой диаграммы были сформулированы различные квантово-статистические модели строения вещества, основанные на использовании приближения Борна–Оппенгеймера [30] (также известное как адиабатическое приближение). В рамках этого приближения атомные ядра рассматриваются как фиксированные силовые центры по отношению к электронам. При изменении положения ядер, принимается (вследствие выполнения условия малости массы электрона m_e по сравнению с массой ядра m_n), что электроны практически мгновенно подстраиваются под новую конфигурацию системы. Таким образом, рассматривается равновесное состояние электронной подсистемы для заданного положения ядер. Дополнительно предполагается, что равновесное состояние электронной подсистемы (с учётом электрон–электронного и электрон–ионного взаимодействий) соответствует наиболее вероятному распределению электронов по энергиям. Тем самым, полную систему электроны–ядра можно описать с помощью отдельных моделей отвечающих за электронную и ионную подсистемы.

Одним из способов описания электронной подсистемы является использование одноцентровых моделей самосогласованного поля. В этих моделях рассматривается единственная сферически-симметричная атомная ячейка, состоящая из центрального ядра и окружающих его электронов. Использование приближения самосогласованного поля позволяет заменить решение многочастичной задачи, в рамках которой отдельно рассматриваются все взаимодействия элементов между собой, одночастичной задачей взаимодействия электронов с усреднённым потенциалом, вид которого в свою очередь зависит от конфигурации электронов. Тем самым, атомный потенциал и электронная плотность согласуются друг с другом.

Самой простейшей и первой разработанной квантово-статистической одно-центральной моделью самосогласованного поля является модель Томаса–Ферми (ТФ), которая была независимо предложена Э. Ферми [31] и Л. Томасом [32]. В рамках этой модели принимается, что все электроны непрерывно распределены в фазовом пространстве в соответствии с распределением Ферми–Дирака. Изначально модель ТФ была сформулирована для холодного ($T = 0$) изолированного ($\rho = 0$) атома, а затем обобщена [33] на произвольные температуры и плотности. Для учёта температуры используется приближение среднего атома (или среднего иона), в котором вместо набора ионов с различными электронными конфигурациями рассматривается единственный ион со средними нецелыми числами заполнения электронных состояний. В условиях термодинамического равновесия эти числа заполнения подчиняются статистике Ферми–Дирака. Плотность же вещества связывается с размером рассмотренной электронейтральной атомной ячейки, чей объём принимается равным объёму, приходящийся в среднем на один атом вещества (ячейка Вигнера–Зейтца).

Разработка модели ТФ позволила дать ряд важных численных оценок. В частности, с помощью этой модели была получена зависимость энергии связи электрона от заряда ядра [34; 35]. Тем не менее, использованные при формулировке модели приближения существенно ограничивают диапазон температур и плотностей, в которых модель может быть применена для расчёта термодинамических свойств вещества. Отсутствие учёта обменных, квантовых (отклонение от квазиклассического приближения), градиентных (связанных с конечным значением электронной плотности в окрестности ядра), корреляционных (интерференционных) и оболочечных (влияние связанных состояний) эффектов позволяет говорить о корректном описании моделью ТФ поведения вещества только в предельных случаях сильного сжатия, когда вещество ведет себя как вырожденный Ферми-газ, и при достаточно высокой температуре (но ниже релятивистского предела $T = m_e c^2 \sim 10^5$ эВ), когда электронный газ почти однороден и идеален [36].

Для улучшения результатов модели ТФ в дальнейшем были предложены различные поправки к этой модели, которые последовательно включали в себя учёт обменных, квантовых, корреляционных, оболочечных и других эффектов. Способ отдельного учёта обменного взаимодействия в квазиклассическом приближении путём выражения эффективного обменного потенциала как добавочного слагаемого к атомному потенциалу по модели ТФ был предложен П. Дираком [37]. В дальнейшем применение этого метода также было расширено на произвольные температуры и плотности, что привело к построению конечнотемпературной модели Томаса–Ферми–Дирака (ТФД) [38].

Модель ТФ также может быть усовершенствована путем добавления обменных и квантовых поправок второго порядка по \hbar , что приводит к уравнениям модели ТФП (также известной как модель Томаса–Ферми–Киржница) [39; 40]. В работе [41] для модели ТФП был предложен способ расчёта УРС вещества и было показано, что термодинамические зависимости по модели ТФП более близки к экспериментальным данным [42] по сравнению с результатами по моделям ТФ и ТФД. В дальнейшем Н. Н. Калиткиным и Л. В. Кузьминой [43] были получены исчерпывающие таблицы термодинамических величин, а именно давления, энергии, энтропии и химический потенциал, для широкого диапазона температур и плотностей рассчитанные при $Z = 1$. При этом, вследствие свойства автомодельности уравнений модели ТФП (что, впрочем, верно и для исходных уравнений модели ТФ) УРС для любого химического элемента может быть получено из приведённых таблиц с помощью простых формул преобразований. Хотя применение квантовой и обменной поправок к модели ТФ для ряда веществ позволило расширить область согласия с экспериментальными данными, одновременно с этим, применение теории возмущений, в рамках которой были получены формулы для величин поправок, накладывает естественное ограничение на область физической достоверности модели ТФП, для которой должно выполняться условие малости поправок. В частности, при $Z = 1$ для концентрации электронов $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$ значение величины поправки больше исходных значений величин по модели ТФ при температурах $T \lesssim 2 \text{ эВ}$ [43;

44]. Тем не менее, область применимости модели ТФП для расчёта термодинамических зависимостей может быть расширена в случае выделения теплового вклада электронов в УРС вещества [44]. К примеру, уравнения состояния, в которых тепловой вклад электронной подсистемы учитывался по модели ТФП, успешно использовались для осуществления гидродинамических расчётов [45] и для интерпретации экспериментальных данных по относительным измерениям ударной сжимаемости [46; 47].

Одной из проблем исходной модели ТФ является наличие особенности вблизи ядра у электронной плотности, из-за которой завышаются оценки энергии связи для лёгких элементов (при малых Z) [48]. Для устранения этой особенности путём аккуратного учёта окрестности ядра была предложена градиентная поправка к модели ТФ (поправка Скотта) [48; 49]. Одновременный учёт квантовой, обменной и градиентной поправок в выражениях для кинетической энергии и энтропии электронов был осуществлён в квантово-статистической модели (КСМ), предложенной Н. Н. Калиткиным [50]. По сравнению с моделями ТФ, ТФД и ТФП результаты расчётов термодинамических характеристик по модели КСМ [51] показывают лучшее согласие с экспериментальными данными. Модель КСМ успешно применяется для расчёта УРС широкого класса веществ, в том числе представляющих собой смесь химических элементов [52]. В частности, в работе [53] для широкого диапазона давлений с помощью модели КСМ были получены простые аппроксимации ударных адиабат сплошных и пористых образцов 79 простых веществ и 4 молекулярных соединений (H_2 , D_2 , N_2 и CO). В дальнейшем эти расчёты были использованы при построении полуэмпирических зависимостей для ударных адиабат ряда веществ, рекомендованных к использованию в качестве эталонов в экспериментах по измерениям ударно-волновых характеристик [54; 55].

Кроме того, было показано [56], что в рамках квазиклассического приближения могут быть учтены и эффекты силовой корреляции, отражающие нерегулярные отклонения от используемого приближения независимых частиц,

т. е. невозможность говорить о состоянии отдельного электрона в усреднённом поле остальных частиц из-за их взаимного влияния, выходящего за рамки самосогласованного описания. При этом наблюдаемая нерегулярность физических величин наблюдается как для электронов с непрерывным спектром энергии, связанная с интерференцией волн де Бройля (собственно корреляционные эффекты), так и для электронов с дискретным спектром энергии, т. е. для связанных состояний (оболочечные эффекты). Оболочечные эффекты проявляются через осциллирующий профиль пространственного распределения электронной плотности, и соответствующем осциллирующем поведении термодинамических зависимостей [57; 58]. Причём амплитуда этих осцилляций сравнима с вкладом обменных и квантовых эффектов. Один из способов учёта оболочечных эффектов в рамках квазиклассического рассмотрения, не связанный непосредственно с поиском численного решения уравнения Шрёдингера, был предложен Д. А. Киржницем и Г. В. Шпатаковской [59; 60]. В работе [61] применение этого метода в рамках задачи расчёта термодинамических характеристик было распространено на область горячей плотной плазмы, что позволило получить характерные ступенчатые профили степени ионизации в зависимости от температуры и плотности вещества (тепловая ионизация и ионизация давлением). Одновременный учёт квантовой, обменной, градиентной и оболочечной поправок с сохранением свойства автомодельности был осуществлён в усовершенствованной модели Томаса–Ферми (УТФ) [62; 63]. Особенности, возникающие при учёте оболочечной поправки в широкой области термодинамических параметров, в том числе и при относительно низких температурах, исследованы в работах [64; 65].

Оболочечные эффекты также могут быть учтены непосредственно в соответствии с квантово-механическим уточнением модели ТФ. В этом случае электронная плотность дискретного спектра вычисляется с использованием одночастичных волновых функций, являющихся решениями одномерного уравнения Шрёдингера в самосогласованном атомном потенциале с заданными граничными условиями, тогда как для учёта электронов непрерывного спектра

используется квазиклассическое приближение (модель Хартри) [66]. Но в подобной формулировке за рамками остаётся учёт обменных эффектов, вследствие чего при высоких плотностях и относительно низких температурах результаты модели Хартри могут быть хуже согласованы с реальным поведением вещества по сравнению с результатами квазиклассических моделей [67]. Кроме того, в случае тяжёлых элементов ($Z \gtrsim 50$) на характер связи электронов внутренних оболочек имеют существенное влияние релятивистские эффекты, и тогда, для получения более адекватных оценок уровней энергии, вместо уравнения Шрёдингера следует использовать уравнение Дирака. Алгоритмы и примеры расчётов уровней энергии и радиальной электронной плотности по модели Хартри, как в нерелятивистском, так и в релятивистском случаях, представлены в [28, с. 76–89].

С помощью вариационного принципа, основанного на требовании в равновесном случае минимума большого термодинамического потенциала относительно вариаций волновых функций и чисел заполнения электронных состояний, могут быть получены уравнения Хартри–Фока [68; 69], использующие представление полной волновой функции многоэлектронной системы в виде произведения одночастичных функций в рамках приближения самосогласованного поля. В дальнейшем уравнения Хартри–Фока были обобщены Т. Мацубарой [70] на случай произвольных температур и плотностей.

Для упрощения решения системы уравнений Хартри–Фока Д. Слэтером [71] было предложено заменить слагаемое, отвечающее за обменное взаимодействие, аппроксимацией, полученной в квазиклассическом приближении, что позволяет привести систему к уравнению с локальным потенциалом. Изначально выражение для эффективного обменного потенциала было получено для свободного атома при $T = 0$ [71] (в дальнейшем это результат был уточнён в работах [72; 73], посвящённых методу функционала электронной плотности). На произвольные температуры этот подход был обобщён в работах [74; 75], что привело к созданию модифицированной модели Хартри–Фока–Слэтера

(ХФС) [76], широко используемую в том числе и для расчётов УРС различных веществ [28]. В модели ХФС, также как и в модели Хартри, волновые функции электронов дискретного спектра находятся из решения уравнения Шрёдингера (или Дирака в релятивистском случае [77]) с нулевыми граничными условиями в ячейке, а состояния с энергией выше заданного граничного значения учитываются в квазиклассическом приближении. Кроме того, при относительно небольших температурах и достаточно высоких плотностях вещества можно отдельно учесть наличие в энергетическом спектре полос разрешённых энергий (зон). Для этого в различных вариантах модели ХФС используются свой собственный вид граничных условий для волновых функций электронов, формирующих зонную структуру.

Для оценки ширины электронных зон Б. Рожняй [77] предложил использовать условия, при которых на границе ячейки требуется равенство нулю либо самой волновой функции электронов промежуточной группы, либо её производной. При этом для зависимости плотности состояний в пределах зоны задаётся конкретный вид распределения. Но применение этого метода оправдано только для достаточно узких зон разрешённых энергий, ширина которых значительно меньше расстояния между соседними уровнями, что справедливо только при относительно низких плотностях и температурах. Тем не менее, эти граничные условия могут быть использованы при реализации расчётов термодинамических функций в широком диапазоне параметров, в том числе и в области характерной для ударного сжатия конденсированных веществ (для плотностей вплоть до $\approx 6\rho_0$) [78; 79]. Эти условия также используются в релятивистской модели НОРЕ [80], в которой, в отличие от модели ХФС, низкоэнергетичные и высокоэнергетичные состояния непрерывного спектра рассматриваются отдельно с помощью квантово-механического и квазиклассического подходов соответственно.

Более точным подходом учёта зонной структуры, применимым для широких зон, является использование квазипериодических граничных условий [81],

вытекающих из трансляционной симметрии в методе ячеек Вигнера–Зейтца (квазизонная модель). Ранее квазизонная модель была реализована в многопроцессорной программе TH_BAND, разработанной в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН А.С. Грушиным, и применялась для расчёта кривых холодного сжатия простых веществ [82; 83]. Помимо этого, в работе [84] этот подход был применён для расчёта ударной адиабаты жидкого атомарного азота, где было получено хорошее согласие между результатами расчётов и экспериментальными данными.

Важно отметить, что предложенное разделение электронных состояний на относящиеся к непрерывному и дискретному спектру носит относительный характер, и, в общем случае, одно и то же состояние может быть рассмотрено различными способами даже в рамках одной модели. В перечисленных выше моделях численным критерием разделения состояний является значение границы непрерывного спектра ε_0 (все состояния с энергиями $\varepsilon \geq \varepsilon_0$ приписываются к непрерывному спектру). В работе [60] для выбора значения границы непрерывного спектра было предложено использовать выражение $\varepsilon_0 = -\sqrt{\rho_e(r_0)}$, где $\rho_e(r_0)$ — радиальная плотность электронов на границе атомной ячейки. Но в этом случае, с ростом плотности вещества ρ наблюдаются физически необоснованные последовательные переходы дискретных уровней энергии в непрерывный спектр, сопровождающиеся скачками в термодинамических функциях. В работе [76] для выбора значения ε_0 предложено решать отдельное уравнение, требующее сохранения числа рассматриваемых различными способами состояний, что приводит к плавному поведению кривых холодного сжатия в области высоких давлений. Тем не менее, это уравнение может иметь несколько решений, и для однозначности необходимо подобрать критерий выбора одного из них. В [28, с. 304] для проведения широкодиапазонных расчётов УРС использовался эмпирический критерий, заключающийся в фиксации номера корня уравнения, отвечающего за сохранение числа рассматриваемых состояний, таким образом, чтобы при нормальной плотности и нулевой температуре ($T = 0$, $\rho = \rho_0$) значение энергии ε_0 лежало в районе зоны проводимости в случае металлов или в районе верхнего уровня энергии электронов

в других случаях. Но даже в этом случае, при определённых значениях температур и плотностей возможно изменение числа корней исходного уравнения, что затрудняет получение гладких термодинамических зависимостей при широкодиапазонных расчётах [85].

Помимо перечисленных моделей, в которых рассматривается только электронейтральная система из ядра и относящихся к нему электронов, также широко распространены одноцентровые модели самосогласованного поля, в которых дополнительно рассматривается внешняя система за пределами атомной ячейки. В этом случае, требование минимума большого термодинамического потенциала накладывается на полную систему (ячейка+внешняя система), а граничные условия могут быть заданы за пределами ячейки, в том числе и на бесконечном удалении от ядра.

Одной из таких квантово-статистических моделей самосогласованного поля является модель Либермана [86], реализованная в расчётных кодах INFERNO [87], PURGATORIO [88], PARADISIO [89], EOSTA [90] и RESEOS [91]. В модели Либермана плотность положительных зарядов, внешних по отношению к центральному иону, принимается равной нулю внутри ячейки (для которой сохраняется выполнение условия электронейтральности) и постоянной за пределами ячейки. При этом электронная плотность положительных зарядов компенсируется постоянной по пространству плотностью внешних отрицательных зарядов, таким образом, чтобы вся система также была в целом электронейтральна. Граничные условия для волновых функций задаются на бесконечности. Состояния с непрерывным спектром энергии рассматриваются в том же приближении, что и связанные состояния, так что переход из дискретного спектра в непрерывный происходит плавно [92], но это связано с появлением резких пиков в функции плотности состояний (так называемые резонансные состояния [93]). Модель Либермана нашла широкое применение в моделировании различных теплофизических свойств веществ [94], в том числе и для расчётов УРС [80; 91; 95–97]. Важно отметить, что используемые модельные представления не позволяют получить уравнения

модели Либермана в полном соответствии с вариационным принципом, и в следствие этого можно говорить только о приближённом выполнении условия термодинамической согласованности.

Дальнейшим развитием предложенного Либерманом подхода является модель вариационного среднего атома в квантовой плазме (VAAQP) [98—100], в которой на ячейку Вигнера–Зейтца не накладывается условие электронейтральности. В отличие от модели Либермана, модель VAAQP полностью сформулирована согласно вариационному принципу, что позволило добиться термодинамической согласованности при вычислении вклада в УРС электронной подсистемы [101].

Общим ограничением перечисленных выше моделей, использующих ячеечное приближение, является отсутствие в них учёта межчастичных ион–ионных корреляций, проявляющихся на расстояниях превышающих размер ячейки Вигнера–Зейтца, что важно для описания типичных состояний плазмы, характеризующихся дальнедействующими корреляциями, когда сфера Дебая содержит большое количество частиц. Таким образом, в области относительно низких температур ($T \lesssim 1$ эВ) одноцентровые модели самосогласованного поля, как правило, неприменимы. Для учета ион–ионных взаимодействий в рамках ячеечного приближения необходимо задействовать дополнительные модельные представления. Например, можно связать модель самосогласованного поля (как в квазиклассической, так и квантово-механической формулировках) с квантовыми уравнениями Орнштейна–Цернике, и тем самым получить парную ион–ионную корреляционную функцию для конкретного элемента (модель Старрета–Саумона) [102—105].

Более простым способом учёта вклада ионной подсистемы в термодинамические зависимости является использование отдельных ионных моделей, к примеру, таких как идеального газа Больцмана (ИГ) [106], невзаимодействующих твёрдых сфер (КС) [107], однокомпонентной плазмы (ОКП) [108], заряженных твёрдых сфер (ЗТС) [109] или осциллирующих ядер (ОЯ) [110], выходящих за рамки ячеечного представления и описывающих поведение ионов

как поведение некоторого идеализированного газа взаимодействующих (или не взаимодействующих) частиц. При этом параметры этих моделей, такие как размер или заряд частиц, могут зависеть от результатов расчётов электронной подсистемы по одной из квантово-статистических моделей среднего атома. Стоит отметить, что модель описания ионной подсистемы может подбираться под конкретную квантово-статистическую модель среднего атома, описывающей электронную подсистему, исходя из соображений лучшего согласия их комбинации с имеющимися экспериментальными данными. В частности, это было сделано в работе [62], где при построении ударных адиабат по моделям ТФП и УТФ для учёта вклада ионов использовалась модель ОКП, а в работе [111] расчёт ударных адиабат алюминия производился по комбинации моделей ХФС и ЗТС. Тогда как более комплексное сравнение комбинаций различных ионных, и электронных моделей представлено в литературе намного реже [28; 84; 112], что, учитывая сравнимый вклад в УРС ионных и электронных подсистем в области максимально достижимых в ударной волне сжатий и недостаточную физическую достоверность используемых ионных моделей, в некоторых случаях не позволяет в полной мере оценить область достоверного описания экспериментальных данных конкретной моделью и сравнить результаты разных квантово-статистических подходов между собой.

Кроме одноцентровых моделей самосогласованного поля существует несколько других теоретических подходов, которые успешно применяются для описания термодинамических свойств вещества и, в то же время, не требуют дополнительной эмпирической информации (*ab initio* расчёты). В частности, широкое применение [113] получил метод квантовой молекулярной динамики (КМД) [114], основанный на использовании ранее упомянутой теории функционала электронной плотности [72] для описания электронной подсистемы и ньютоновской динамики для ионной подсистемы. Тем не менее, расчеты методом КМД требуют большой вычислительной мощности и становятся практически неосуществимыми при относительно высоких температурах ($T \gtrsim 1$ эВ)

и давлениях ($P \gtrsim 1$ ТПа), когда заселяется слишком много орбиталей. При этом применение приближений, используемых в моделях среднего атома, становится более оправданным с повышением температуры или плотности [115]. Сравнение результатов расчётов термодинамических зависимостей полученных по моделям среднего атома и КМД приведено, например, в работах [116—121].

Глава 1. Используемые модели и алгоритм расчёта термодинамических функций

1.1 Модели расчёта электронной составляющей уравнения состояния

Для описания электронной подсистемы в настоящей работе используется три квантово-статистических одноцентровых модели самосогласованного поля: ТФ, ТФП и ХФС. Во всех этих моделях рассматривается единственная сферически-симметричная атомная ячейка, радиус r_0 которой равен радиусу ячейки Вигнера–Зейтца и связан с плотностью вещества ρ через соотношение

$$r_0 = \frac{1}{a_B} \sqrt[3]{\frac{3A_u m_u}{4\pi\rho}}, \quad (1.1)$$

где a_B — Борковский радиус, A_u — атомная масса вещества, m_u — атомная единица массы.

На ячейку дополнительно накладывается условие электронейтральности:

$$4\pi \int_0^{r_0} \rho_e(r) r^2 dr = Z, \quad (1.2)$$

т. е. рассматривается замкнутая система из неподвижного центрального ядра с зарядом Z и окружающих его Z электронов, которые распределены в пространстве ячейки с соответствующей радиальной электронной плотностью ρ_e . Сама электронная плотность связана с атомным потенциалом V через уравнение Пуассона:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rV) = 4\pi\rho_e. \quad (1.3)$$

Итого решается самосогласованная задача определения пространственного распределения отрицательного заряда во внешнем эффективном потенциале, чей вид в свою очередь обусловлен наличием положительно заряженного ядра (кулоновский потенциал Z/r) и системы окружающих его отрицательно заряженных частиц.

1.1.1 Модель Томаса–Ферми

Для описания термодинамики вещества, находящегося в состоянии с экстремально высокой плотностью или температурой, успешно применяется модель ТФ [33]. В основе этой модели лежит использование квазиклассического приближения для описания электронов, которые принимаются непрерывно распределенными в фазовом пространстве согласно статистике Ферми–Дирака:

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp[(\varepsilon - \mu)/\theta]}. \quad (1.4)$$

Здесь N — число электронных состояний с энергией ε .

Решение уравнения Пуассона (1.3) для самосогласованного потенциала по модели ТФ, удовлетворяющего граничным условиям

$$rV_{\text{TF}}(r)|_{r=0} = Z, \quad V_{\text{TF}}(r_0) = 0, \quad V'_{\text{TF}}(r_0) = 0, \quad (1.5)$$

имеет следующий вид:

$$\rho_{\text{eTF}}(r) = \frac{\sqrt{2}\theta^{3/2}}{\pi^2} I_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}(r)), \quad 0 \leq r \leq r_0, \quad (1.6)$$

где $I_k(x)$ — функция Ферми–Дирака, определяемая как

$$I_k(x) = \int_0^\infty \frac{y^k}{1 + \exp[y - x]} dy. \quad (1.7)$$

Найденная зависимость $\Phi_{\text{TF}}(r) = [V_{\text{TF}}(r) + \mu_{\text{TF}}]/\theta$ позволяет вычислить термодинамические функции электронной подсистемы [33; 122], в частности, химический потенциал μ_{TF} , давление P_{eTF} и энергию электронов E_{eTF} :

$$\mu_{\text{TF}} = \theta\Phi_{\text{TF}}(r_0), \quad (1.8a)$$

$$P_{\text{eTF}} = \frac{(2\theta)^{5/2}}{6\pi^2} I_{3/2}(\Phi_{\text{TF}}(r_0)), \quad (1.8b)$$

$$E_{\text{eTF}} = \frac{4\sqrt{2}\theta^{5/2}}{3\pi} \left(2r_0^3 I_{3/2}(\Phi_{\text{TF}}(r_0)) - 3 \int_0^{r_0} r^2 I_{3/2}(\Phi_{\text{TF}}(r)) dr \right) - E_{0\text{eTF}}. \quad (1.8b)$$

Здесь $E_{0\text{eTF}} = -0.76874512421364Z^{7/3}$ — энергия холодного изолированного атома ($E_{\text{eTF}} = 0$ при $\theta = 0$, $\rho = 0$).

1.1.2 Модель Томаса–Ферми с квантовой и обменной поправками

Учёт квантовых и обменных поправок второго порядка по \hbar в рамках модели ТФ приводит к уравнениям модели ТФП [39]. Атомный потенциал по модели ТФП связан с атомным потенциалом по модели ТФ через поправочную функцию $\zeta(r)$ следующим образом:

$$\Phi_{\text{TFC}} = \frac{V_{\text{TFC}} + \mu_{\text{TFC}}}{\theta} = \Phi_{\text{TF}} + \hbar^2 \frac{\sqrt{2}}{6\pi\sqrt{\theta}} \left(I'_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}) + \zeta \right). \quad (1.9)$$

Функция $\zeta(r)$, в свою очередь, находится из решения неоднородного линейного уравнения для функции $\chi(x) = x\zeta(xr_0)$:

$$\chi''(x) = \frac{4\sqrt{2\theta}r_0^2}{\pi} \left(\chi(x)I'_{1/2}(\Phi(xr_0)_{\text{TF}}) + xY'(\Phi(xr_0)_{\text{TF}}) \right) \quad (1.10)$$

с граничными условиями $\chi(0) = 0$ и $\chi(1) = \chi'(1)$. Здесь под функцией $Y(x)$ обозначено выражение

$$Y(x) = I_{1/2}(x)I'_{1/2}(x) + 6 \int_{-\infty}^x \left(I'_{1/2}(t) \right)^2 dt. \quad (1.11)$$

Подставляя функции V_{TFC} и ρ_{eTFC} вместо V и ρ_{e} в уравнение (1.3), получается следующая зависимость для электронной плотности по модели ТФП:

$$\rho_{\text{eTFC}} = \rho_{\text{eTF}} + \frac{\theta}{3\pi^3} \left(\zeta I'_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}) + 7(I'_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}))^2 + 2I_{1/2}(\Phi_{\text{TF}})I''_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}) \right) + \frac{\sqrt{2\theta}(\nabla\Phi_{\text{TF}})^2}{24\pi^2} I'''_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}). \quad (1.12)$$

Приведём выражения для химического потенциала μ_{TFC} , давления P_{eTFC} и энергии электронов E_{eTFC} , полученные в работах [39; 41]:

$$\mu_{\text{TFC}} = \mu_{\text{TF}} + \frac{\sqrt{2\theta}}{6\pi} \left(I'_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}(r_0)) + \chi(1) \right), \quad (1.13a)$$

$$P_{\text{eTFC}} = P_{\text{eTF}} + \frac{\theta^2}{3\pi^3} \left(\chi(1) I_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}(r_0)) + Y(\Phi_{\text{TF}}(r_0)) \right), \quad (1.13b)$$

$$E_{e\text{TFC}} = E_{e\text{TF}} + \frac{2\theta^2 r_0^3}{3\pi^2} \left(\int_0^1 t\chi(t) I_{1/2}(\Phi_{\text{TF}}(tr_0)) dt + 2 \int_0^1 t^2 Y(\Phi_{\text{TF}}(tr_0)) dt \right) + \frac{Z\sqrt{2\theta}}{6\pi} \chi'(0) - \Delta E_{0e\text{TFC}}. \quad (1.13\text{в})$$

Значение величины $\Delta E_{0e\text{TFC}} = -0.269900169992Z^{5/3}$ определено таким образом, что $E_{e\text{TFC}} = 0$ для бесконечно разреженного вещества ($\rho = 0$) при нулевой температуре ($\theta = 0$).

1.1.3 Модель Хартри–Фока–Слэтера

Модели ТФ и ТФП дают электронную плотность ρ_e , которая согласована в рамках квазиклассического приближения с полученным атомным потенциалом V . Но при этом волновые функции $\psi(r)$, вычисленные в этом потенциале, дают отличную от исходной электронную плотность

$$\rho_{e\psi} = \sum_{\alpha} N_{\alpha} |\psi_{\alpha}|^2 \neq \rho_e. \quad (1.14)$$

Это происходит вследствие того, что эти модели не передают осцилляций волновых функций и, тем самым, осцилляций электронной плотности [28, с. 76].

В модели ХФС эти осцилляции эффективно учитываются в рамках квантово-механического подхода. На рисунке 1.1(а) представлен характерный вид радиальной зависимости электронной плотности в пределах атомной ячейки, полученный из расчётов по моделям ТФ, ТФП и ХФС. Здесь можно наблюдать качественное различие в квазиклассическом и квантово-механическом случаях, выражающееся в осцилляции значений электронной плотности по модели ХФС относительно результатов моделей ТФ и ТФП. Эти осцилляции также проявляются при расчёте термодинамических характеристик вещества, в частности, при относительно высоких температурах вдоль изохоры наблюдаются осцилляции значений показателя адиабаты электронной подсистемы (смотри

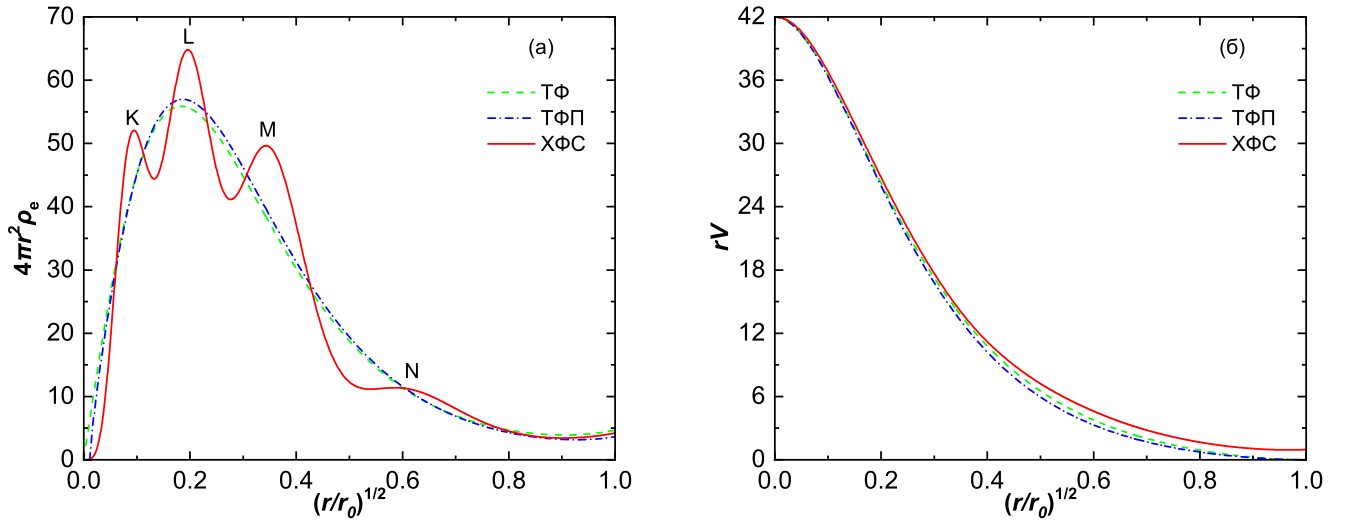


Рисунок 1.1 — Радиальная зависимость (а) электронной плотности $4\pi r^2 \rho_e$ и (б) атомного потенциала Vr от $x = \sqrt{r/r_0}$ для атома молибдена при температуре $T = 1$ эВ и плотности вещества $\rho = 10.22$ г/см³. Расчёты для различных моделей описания электронной подсистемы: зелёная штриховая кривая — ТФ; синяя штрих-пунктирная кривая — ТФП; красная сплошная кривая — ХФС.

рисунок 1.2) [26]. Такое поведение связано с последовательной ионизацией внутренних электронных оболочек с ростом температуры.

В то же время, характерный вид зависимости величины атомного потенциала от расстояния до ядра, представленный на рисунке 1.1(б), качественно схож для всех трёх рассмотренных моделей. Тем самым, полученные с помощью моделей ТФ и ТФП атомные потенциалы могут использоваться в качестве начального приближения в более сложных квантово-механических расчётах по модели ХФС.

В модели ХФС в пределах атомной ячейки состояния электронов классифицируются на состояния с непрерывным спектром энергии (с соответствующей электронной плотностью ρ_{cont}), с дискретным спектром энергии (ρ_{bound}), а также на состояния промежуточной группы (ρ_{band}). Путём выбора значения энергии границы непрерывного спектра ϵ_0 , электроны, дающие основной вклад в осциллирующую часть электронной плотности, относят к дискретному (или промежуточному) спектру, тем самым эффективно учитываются оболочечные эффекты [74]. Величина ϵ_0 определяется из условия сохранения числа рассмат-

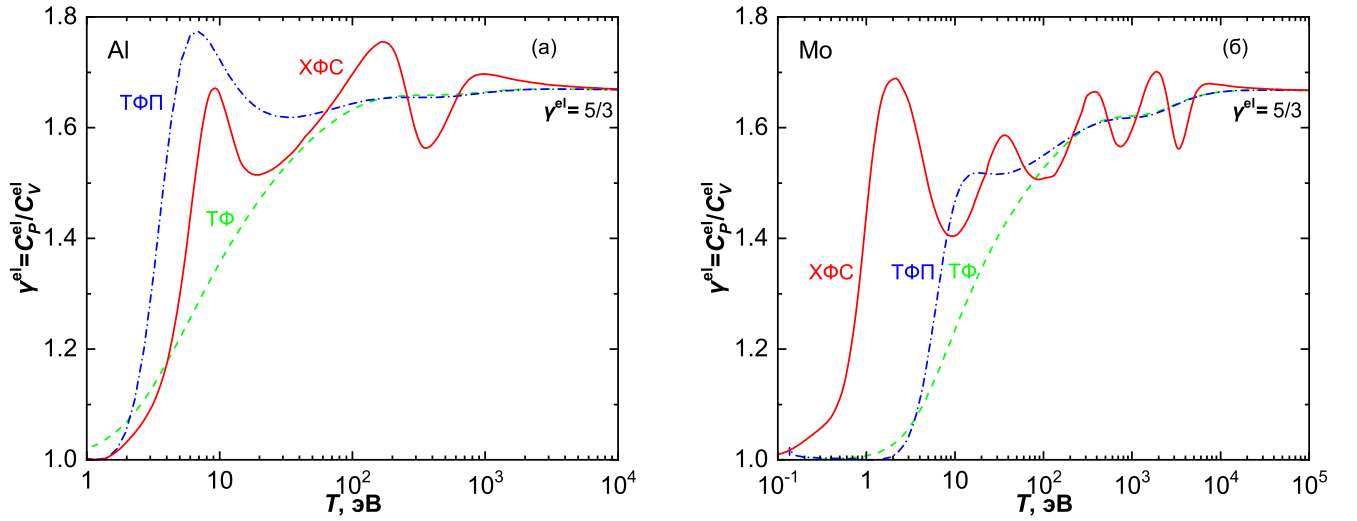


Рисунок 1.2 — Зависимость показателя адиабаты электронной подсистемы $\gamma^{\text{el}} = C_P^{\text{el}}/C_V^{\text{el}}$ от температуры T при постоянной плотности ρ для (а) алюминия ($\rho = 2.712$ г/см³) и (б) молибдена ($\rho = 10.22$ г/см³) согласно трём различным моделям: зелёная штриховая кривая — ТФ; синяя штрих-пунктирная кривая — ТФП; красная сплошная кривая — ХФС.

риваемых состояний:

$$\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \int_0^{r_0} (y_0\theta)^{3/2} r^2 dr = \sum_{nl} 2(2l+1) + \sum_{nlm} \int_0^{k_0} \frac{6k^2 dk}{k_0^3}. \quad (1.15)$$

Здесь использованы следующие обозначения: $y_0 = \max\{0; (V(r) + \epsilon_0)/\theta\}$ и $k_0 = (9\pi/2)^2$. Суммирование по числам n (главное квантовое число), l (орбитальное квантовое число) и m (магнитное квантовое число) производится только для состояний дискретного и промежуточного спектров с энергиями $\epsilon_{nl} < \epsilon_0$ и $\epsilon_{nlm}(k) < \epsilon_0$ соответственно.

Уравнение (1.15) может иметь несколько решений. При проведении широкодиапазонных расчётов для однозначности решения фиксировалось число состояний, относящихся к дискретному и промежуточному спектрам. При этом число этих состояний α должно быть достаточно велико, а именно должно выполняться условие, что квантово-механический учёт сколько угодно большого числа дополнительных состояний с большими энергиями не приводит к значимым изменениям величин термодинамических функций.

Плотность электронов непрерывного спектра ρ_{cont} вычисляется в квазиклассическом приближении, аналогично модели ТФ:

$$\rho_{\text{cont}}(r) = \frac{\sqrt{2}\theta^{3/2}}{\pi^2} \int_{y_0}^{\infty} \frac{y^{1/2}}{1 + \exp[y - (V(r) + \mu)/\theta]} dy. \quad (1.16)$$

Вклад электронов дискретного спектра ρ_{bound} вычисляется непосредственно по волновым функциям:

$$\rho_{\text{bound}}(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{nl} N_{nl} R_{nl}^2(r). \quad (1.17)$$

Здесь N_{nl} — числа заполнений электронных состояний nl согласно уравнению (1.4):

$$N_{nl} = 2(2l + 1)N(\varepsilon_{nl}) = \frac{2(2l + 1)}{1 + \exp[(\varepsilon_{nl} - \mu)/\theta]}. \quad (1.18)$$

Под ε_{nl} и $R_{nl}(r)$ обозначены собственные значения и радиальные волновые функции, являющиеся решениями уравнения Шрёдингера

$$\left(-\frac{d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - V(r) \right) R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl} R_{nl}(r) \quad (1.19)$$

с граничными условиями $R_{nl}(0) = 0$, $R_{nl}(r_0) = 0$ и условием нормировки

$$\int_0^{r_0} R_{nl}^2(r) dr = 1. \quad (1.20)$$

Для поиска решений этого уравнения используется фазовый метод [123].

Разделение электронов на относящиеся к дискретному и промежуточному спектрам производится по величине их импульса p , определяемой следующим образом:

$$p(r) = \sqrt{2 \left(\varepsilon_{nl} + V(r) - \frac{(l + 0.5)^2}{2r^2} \right)}. \quad (1.21)$$

Электроны приписываются к группе дискретного спектра, если выполняется условие

$$\int_{r_2}^{r_0} |p(r)| dr > 10, \quad r_1 < r_2 \ll r_0, \quad (1.22)$$

где r_1, r_2 — решения (точки поворота) уравнения $p(r) = 0$. Остальные состояния с $\varepsilon < \varepsilon_0$ приписываются к промежуточной группе.

Из-за влияния соседних атомов, спектр электронов промежуточной группы состоит из ряда полос разрешённых энергий (зон). Для учёта зонной структуры используются периодические граничные условия [81] на границе атомной ячейки при $r = |\mathbf{r}| = r_0$:

$$e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\psi_{nlm}(-\mathbf{r}), \quad e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = -e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{nlm}(-\mathbf{r}). \quad (1.23)$$

Здесь \mathbf{r} — радиус-вектор произвольной точки внутри атомной ячейки, \mathbf{k} — квазиимпульс, ψ_{nlm} — волновая функция электрона, разложенная по сферическим гармоникам $Y_{l'm}(\mathbf{r})$ со следующими коэффициентами $A_{nlml'}$:

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \sum_{l'=|m|}^{l'_{\max}} i^{l'} A_{nlml'}(k) \frac{(-1)^m}{r} R_{\varepsilon l'}(r) Y_{l'm}(\mathbf{r}), \quad \sum_{l'=|m|}^{l'_{\max}} A_{nlml'}^2(k) = 1, \quad (1.24)$$

где $k = r_0|\mathbf{k}|$, а энергия электрона промежуточного спектра в состоянии nlm обозначена как $\varepsilon = \varepsilon_{nlm}(k)$. В расчётах степень разложения l' ограничивалась значением $l'_{\max} = 10$. Этого значения достаточно, чтобы рассмотреть все промежуточные состояния, для которых существует классическая область движения электрона внутри атомной ячейки [28, с. 121]. Радиальные волновые функции $R_{\varepsilon l'}$ для электронов промежуточной группы нормируются как обычно:

$$\int_0^{r_0} R_{\varepsilon l'}^2(r) dr = 1. \quad (1.25)$$

Плотность состояний w для электронов промежуточной группы в состоянии nl может быть определена через следующее соотношение:

$$w(\varepsilon) = \sum_{m=-l}^l \sum_{\alpha'} N(\varepsilon) \frac{3k_{\alpha'}^2(\varepsilon)}{k_0^3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} k_{\alpha'}(\varepsilon), \quad (1.26)$$

где суммирование по α' производится для всех ветвей $k_{\alpha'}(\varepsilon)$ обратной $\varepsilon_{nlm}(k)$ функции, которая соответствует зонной структуре, определенной через уравнение (1.23). Результат расчёта плотности состояний для электронов внешних оболочек атома меди, в том числе принадлежащих промежуточной группе, приведён на рисунке 1.3 [4]. Здесь важно отметить, что зона соответствующая уровню 4p имеет более высокую среднюю энергию, чем зона уровня 4d. Этот

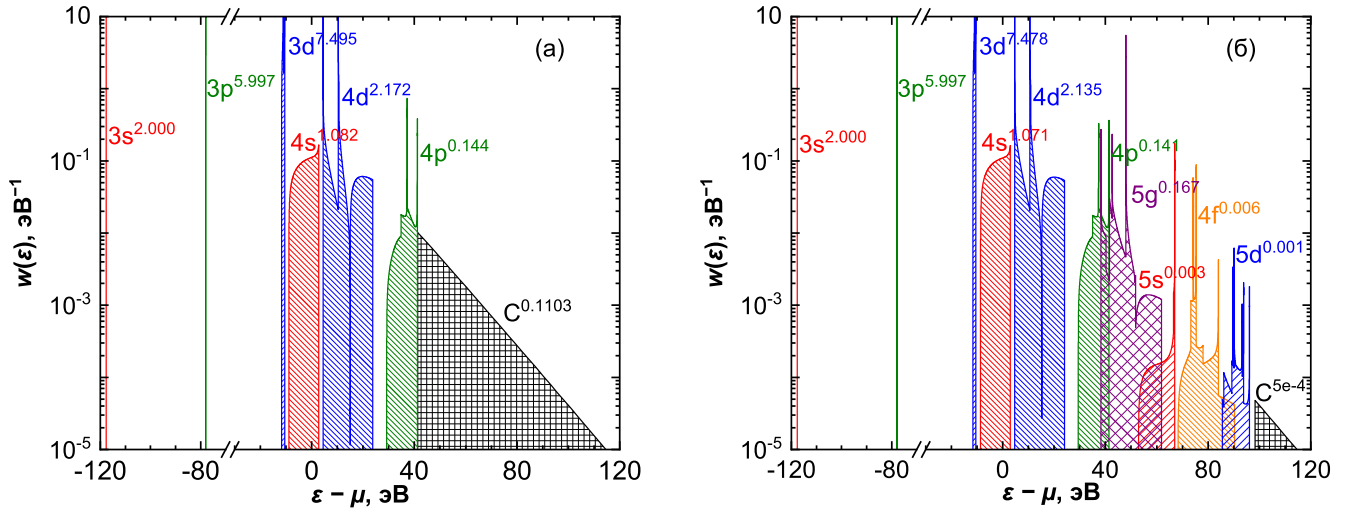


Рисунок 1.3 — Плотность состояний электронов внешних оболочек атома меди при $T = 10$ эВ и $\rho = 8.93$ г/см³, рассчитанная по модели ХФС для различного числа отнесенных к непрерывному спектру (чёрная область, C) состояний: (а) состояния с главным квантовым числом $n > 4$ отнесены к непрерывному спектру ($\mu = -0.614$ эВ, $\epsilon_0 = 40.726$ эВ); (б) состояния с $n > 5$ отнесены к непрерывному спектру ($\mu = -0.9025$ эВ, $\epsilon_0 = 97.3995$ эВ).

результат связан с тем, что формулы для коэффициентов в уравнениях учёта зонной структуры энергетического спектра различны в случаях четных и нечетных орбитальных моментов. При уменьшении плотности вещества или повышении температуры энергетические зоны сжимаются до дискретных уровней и выстраиваются в обычном порядке, соответствующему тому, что энергия уровня монотонно возрастает с увеличением орбитального квантового числа l при заданном главном квантовом числе n [5].

Полезным свойством учёта зонной структуры является то обстоятельство, что при проведении широкодиапазонных расчётов для заданного диапазона температур T и плотностей вещества ρ , непрерывный характер функции плотности состояний энергии электронов промежуточного спектра позволяет из всех решений уравнения (1.15) подобрать такие, чтобы функция $\epsilon_0(T, \rho)$ и соответствующие термодинамические зависимости также были непрерывны в этом диапазоне.

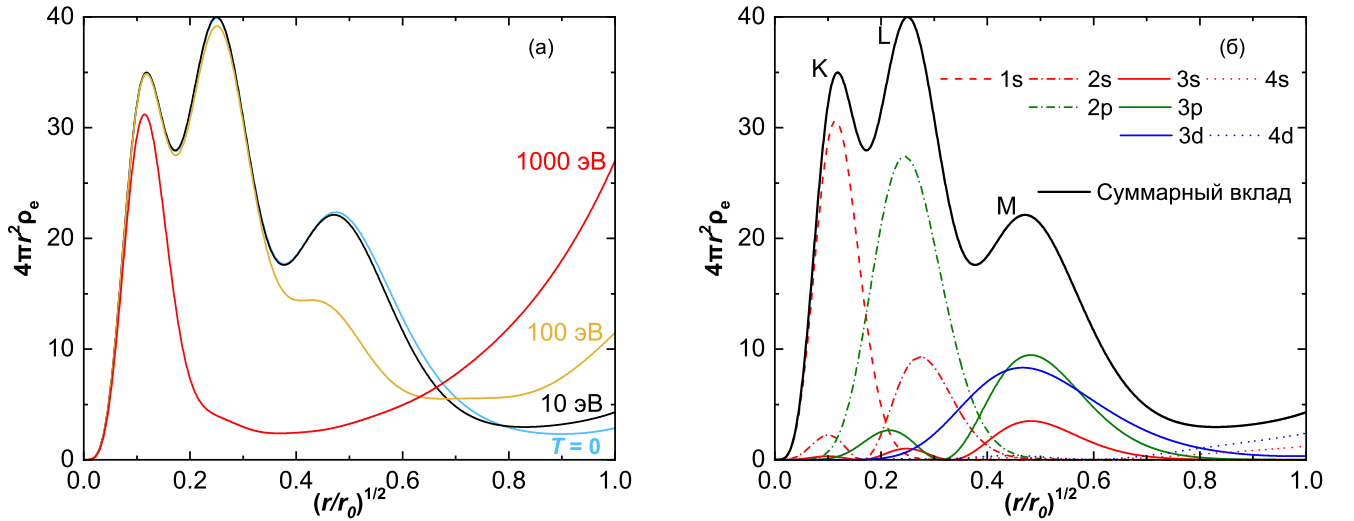


Рисунок 1.4 — Радиальная зависимость электронной плотности $4\pi r^2 \rho_e$ по модели ХФС для атома меди при плотности $\rho = 8.93 \text{ г/см}^3$: (а) расчёт для различных температур $T = 0, 10, 100, 1000 \text{ эВ}$; (б) отдельный вклад электронов в различных конфигурациях при $T = 10 \text{ эВ}$.

Электронная плотность для состояний промежуточной группы ρ_{band} рассчитывается по формуле

$$\rho_{\text{band}}(r) = \frac{1}{2\pi r^2} \sum_{nlml'} \int_0^{k_0} N(\varepsilon) A_{nlml'}^2(k) R_{\varepsilon l'}^2(r) \frac{3k^2}{k_0^3} dk. \quad (1.27)$$

Общая электронная плотность ρ_e по модели ХФС представляется в виде суммы вкладов различных состояний как $\rho_e(r) = \rho_{\text{cont}}(r) + \rho_{\text{bound}}(r) + \rho_{\text{band}}(r)$. Результаты расчётов электронной плотности в атомной ячейке меди при нормальной плотности вещества в зависимости от температуры представлены на рисунке 1.4(а) [4]. Здесь показано, что с ростом температуры происходит последовательная ионизация внутренних М, L и K оболочек (внутренняя электронная структура представлена на рисунке 1.4(б)) и, одновременное с этим, увеличение электронной плотности на границе атомной ячейки $\rho_e(r_0)$. В представленной работе, это значение используется для определения величины среднего заряда иона $Z_0 = (4/3)\pi r_0^3 \rho_e(r_0)$.

Для атомного потенциала $V(r)$ по модели ХФС кроме кулоновского вклада $V_C(r)$, отдельно учитывается обменный член $V_{\text{ex}}(r)$, вычисленный в ква-

зиклассическом приближении [28, с. 108]:

$$V_{\text{ex}}(r) = \frac{\pi\rho_e(r)}{\theta} \left(1 + 5.7 \frac{\rho_e(r)}{\theta^{3/2}} + \frac{\pi^4 \rho_e^2(r)}{3\theta^3} \right)^{-1/3}. \quad (1.28)$$

Кулоновский вклад в самосогласованный потенциал считается аналогично другим ячеечным моделям:

$$V_{\text{C}}(r) = \frac{Z}{r} - 4\pi \left(\frac{1}{r} \int_0^r \rho_e(r') r'^2 dr' + \int_r^{r_0} \rho_e(r') r' dr' \right). \quad (1.29)$$

Итого, $V(r) = V_{\text{C}}(r) + V_{\text{ex}}(r)$.

После того как определены все группы электронных состояний, уравнение (1.15) используется для точного поиска границы непрерывного спектра ε_0 . Химический потенциал μ определяется из уравнения (1.2), соответствующее условию электронейтральности атомной ячейки.

Используя найденные значения химического потенциала, электронной плотности, самосогласованного потенциала и волновых функций электронов дискретного и промежуточного спектра, по следующим формулам [28, с. 297–298] можно вычислить термодинамические величины, в том числе, давление и внутреннюю энергию:

$$\begin{aligned} P_{\text{eHFS}} = & -\frac{3}{4\pi r_0^3 k_0^3} \sum_{nlml'} \int_0^{k_0} N(\varepsilon) A_{nlml'}^2(k) (R_{\varepsilon l'} R'_{\varepsilon l'} + r R_{\varepsilon l'} R''_{\varepsilon l'} - r (R'_{\varepsilon l'})^2) k^2 dk \Big|_{r=r_0} \\ & + \frac{2\sqrt{2}\theta^{5/2}}{3\pi^2} \int_{y_0(r_0)}^{\infty} \frac{y^{3/2} dy}{1 + \exp[y - (V(r_0) + \mu)/\theta]} \\ & + \int_0^{\rho_e(r_0)} V_{\text{ex}}(\rho') d\rho' - \rho_e(r_0) V_{\text{ex}}(\rho_e(r_0)), \quad (1.30a) \end{aligned}$$

Таблица 1 — Рассчитанное значение параметра $E_{0\text{eHFS}}$ выражения (1.306) для различных химических элементов.

Символ	Z	A_u	$E_{0\text{eHFS}}$	$-E_{0\text{eHFS}}Z^{-7/3}$
O	8	15.9994	-73.92533057363	0.5775416451065
Al	13	26.9815	-240.3467471970	0.6048352491818
Si	14	28.086	-287.1451160767	0.6078587659361
Fe	26	55.847	-1258.914778840	0.6286252962690
Cu	29	63.546	-1635.225426074	0.6328716422857
Zn	30	65.38	-1773.909449488	0.6343299047155
Mo	42	95.96	-3969.120516352	0.6473104351020
Pb	82	207.2	-19510.40265055	0.6678832883719

$$\begin{aligned}
E_{\text{eHFS}} = & \sum_{nl} N_{nl} \int_0^{r_0} (\varepsilon_{nl} + V(r)) R_{nl}^2(r) dr \\
& + \frac{6}{k_0^3} \sum_{nlm} \int_0^{k_0} N(\varepsilon) k^2 \int_0^{r_0} (\varepsilon_{nlm}(k) + V(r)) \sum_{l'} A_{nlml'}^2(k) R_{\varepsilon l'}^2(r) dr dk \\
& + \frac{4\sqrt{2}\theta^{5/2}}{\pi} \int_0^{r_0} r^2 \int_{y_0}^{\infty} \frac{y^{3/2} dy}{1 + \exp[y - (V(r) + \mu)/\theta]} dr \\
& - 4\pi \int_0^{r_0} \left(\int_0^{\rho_e(r)} V_{\text{ex}}(\rho') d\rho' - \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \int_0^{\rho_e(r)} V_{\text{ex}}(\rho') d\rho' \right) r^2 dr \\
& - 2\pi \int_0^{r_0} \left(\frac{Z}{r} + V(r) - V_{\text{ex}}(r) \right) \rho_e(r) r^2 dr - E_{0\text{eHFS}}. \quad (1.306)
\end{aligned}$$

Параметр $E_{0\text{eHFS}}$ подбирается так, чтобы $E_{\text{eHFS}} = 0$ при $\theta = 0$, $\rho = 0$. В таблице 1 приведены вычисленные значения $E_{0\text{eHFS}}$ для атомов кислорода, алюминия, кремния, железа, меди, цинка, молибдена и свинца.

Представленные в разделе 1.1 результаты расчётов атомных потенциалов, радиальных электронных плотностей и показателей адиабаты электронной подсистемы опубликованы в статьях [4; 5] и в докладах [18—20; 25; 26].

1.2 Модели расчёта ионной составляющей уравнения состояния

В сильно взаимодействующей неидеальной плазме нельзя в общем случае произвести разделение термодинамической системы на ионную и электронную подсистемы. Тем не менее, в настоящей работе предполагается, что основной вклад в УРС даёт электронная компонента, которая включает в себя эффекты теплового движения электронов, электрон–электронного и электрон–ионного взаимодействия. Тогда как вклад в УРС ионов, учитывающий тепловое движение ионов и все виды взаимодействий (ион–ион, электрон–ион и электрон–электрон), за исключением части вклада электрон–ионных и электрон–электронных взаимодействий, уже учтённого в электронной компоненте, можно рассматривать как поправку. Для расчёта полного давления и энергии, соответствующие значения, полученные по моделям для электронов и ионов, аддитивно складываются.

Когда ионный вклад не зависит от каких-либо параметров электронной подсистемы (что, в частности, справедливо для модели ИГ), для выполнения условия термодинамической согласованности системы требуется достижение минимума термодинамического потенциала отдельно для электронной и ионной подсистем, вместо требования для системы электронов и ионов в целом. В случае моделей ОКП и ЗТС, параметры которых зависят от квантово-статистических расчетов электронной подсистемы, применение описанного подхода может привести к некоторому отклонению от условия минимума полного термодинамического потенциала.

Модель ИГ является простейшим приближением, в котором учитывается только тепловое движение ионов [106, с. 150–152]. Такое приближение применимо для сильно разогретых или сильно разреженных сред. Давление и энергия бoльцмановского идеального газа выражаются следующим образом:

$$P_{\text{ИГ}} = \frac{3\theta}{4\pi r_0^3}, \quad E_{\text{ИГ}} = \frac{3\theta}{2}. \quad (1.31)$$

Таблица 2 — Коэффициенты уравнения (1.34).

i	a_i	b_i
1	-0.895929	4.666486
2	0.11340656	13.675411
3	-0.90872827	1.8905603
4	-0.11614773	1.0277554

В отличие от модели ИГ, в модели ОКП [108] учитывается взаимодействие ионов, которые рассматриваются как точечные частицы с зарядом Z_0 , движущиеся в однородной среде с зарядом противоположного знака ($-Z_0$). В этом приближении для ионного давления и энергии выполняются соотношения:

$$P_{\text{иоср}} = \frac{3\theta}{4\pi r_0^3} \left(1 + \frac{\Delta E_i}{3\theta} \right), \quad E_{\text{иоср}} = \frac{3\theta}{2} + \Delta E_i, \quad (1.32)$$

где ΔE_i — поправка по модели ОКП для внутренней энергии. В работе [108] для этой поправки было получено следующее выражение:

$$\Delta E_i = \begin{cases} \Delta E_{\text{оср}}, & \text{if } \Delta E_{\text{оср}} < 3\theta/2, \\ 3\theta/2, & \text{if } \Delta E_{\text{оср}} \geq 3\theta/2, \end{cases} \quad (1.33)$$

$$\Delta E_{\text{оср}} = \theta \Gamma_e^{3/2} \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{(b_i + \Gamma_e)^{i/2}} - \theta \Gamma_e a_1, \quad \Gamma_e = \frac{Z_0^2}{\theta r_0}. \quad (1.34)$$

Значения коэффициентов a_i , b_i уравнения (1.34) перечислены в таблице 2.

Модель ЗТС [109] учитывает сильное отталкивание между ионами на расстоянии равном эффективному радиусу ионного остова r_{ic} . Величина r_{ic} определяется из равенства:

$$4\pi \int_0^{r_{\text{ic}}} \rho_e(r) r^2 dr = Z - Z_0. \quad (1.35)$$

Вместо точного решения системы уравнений модели ЗТС описанной в работе [109], в настоящей работе используется приближение, в котором к давлению по модели ОКП добавлена поправка отвечающая за конечный размер частиц. При этом выражение для внутренней энергии модели ЗТС принимается аналогичным таковому у модели ОКП. Тем самым, для давления и энергии системы заряженных твёрдых сфер выполняется:

$$P_{\text{iCHS}} = \frac{3\theta}{4\pi r_0^3} \left(1 + \frac{2\eta(2+\eta)}{(1-\eta)^2} + \frac{\Delta E_i}{3\theta} \right), \quad (1.36a)$$

$$E_{\text{iCHS}} = \frac{3\theta}{2} + \Delta E_i, \quad (1.36b)$$

где $\eta = (r_{\text{ic}}/r_0)^3$ — параметр упаковки [28, с. 301].

Получив значения для давления P_e и энергии E_e электронной подсистемы по одной из выбранных квантово-статистических моделей, а также давление P_i и энергию E_i ионной подсистемы, полное давление P (в Па) и удельная энергия E (в Дж/кг) находятся путём аддитивного сложения найденных значений:

$$P = \frac{E_{\text{H}}}{a_{\text{B}}^3}(P_e + P_i), \quad E = \frac{E_{\text{H}}}{A_{\text{u}}m_{\text{u}}}(E_e + E_i). \quad (1.37)$$

1.3 Алгоритм расчёта самосогласованных потенциалов для смеси химических элементов

Задача определения самосогласованных атомных потенциалов для смесей химических элементов является более сложной, по сравнению с задачей для простых веществ. В термодинамически равновесных системах состоящих из частиц различных видов, должно выполняться дополнительное условие на равенство химических потенциалов μ_j , $j = 1, \dots, N_{\text{m}}$ каждого из N_{m} компонентов смеси [106].

В работе [29] для квантово-статистических ячеечных моделей был предложен метод согласования химических потенциалов компонент смеси, рассчитанных отдельно для каждого из элементов. В настоящей работе этот метод применяется для самосогласования потенциалов, полученных по моделям ТФ, ТФП и ХФС. Подробное описание этого метода приведено в работе [29], здесь остановимся лишь на основных его особенностях.

Рассмотрим смесь с плотностью ρ_{m} и температурой θ из компонент с атомными весами A_{uj} , радиусами атомной ячейки r_{0j} , парциальными плотностями ρ_j и массовыми долями m_j/A_{uj} . Аналогично уравнению (1.1) записывается

связь между r_{0j} и ρ_j для j -ой компоненты:

$$r_{0j} = \frac{1}{a_B} \sqrt[3]{\frac{3A_{uj}m_u}{4\pi\rho_j}}. \quad (1.38)$$

Тогда, учитывая условие равенства объёма смеси сумме объёмов её компонент, следует следующая связь между массовыми долями и радиусами атомных ячеек:

$$\sum_{j=1}^{N_m} \frac{m_j}{A_{uj}} r_{0j}^3 = \rho_m^{-1} \sum_{j=1}^{N_m} m_j = B_m. \quad (1.39)$$

Здесь B_m — величина, прямо пропорциональная объёму смеси, отнесенному к среднему атому.

Далее приведем итерационный метод согласования химических потенциалов. На шаге итерации (p) для каждого из компонентов смеси, по выбранной квантово-статистической ячеечной модели определяется значение приведённого химического потенциала $\eta_j = -\mu_j/\theta$ в зависимости от куба радиуса ячейки: $\eta_j^{(p)} = \eta_j(r_{0j}^{(p)})$. Тогда величины радиусов ячеек на следующем шаге ($p+1$) находятся благодаря следующему соотношению:

$$r_{0j}^{3(p+1)} = r_{0j}^{3(p)} + \frac{Y_m^{(p)} - \eta_j^{(p)}}{\eta_j'^{(p)}}. \quad (1.40)$$

Здесь $Y_m^{(p)}$ — приведённый химический потенциал смеси на шаге итерации (p), определённый следующим образом:

$$Y_m^{(p)} = \left[B_m + \sum_{j=1}^{N_m} \frac{m_j}{A_{uj}} \left(\frac{\eta_j^{(p)}}{\eta_j'^{(p)}} - r_{0j}^{3(p)} \right) \right] \left[\sum_{j=1}^{N_m} \frac{m_j}{A_{uj}} \frac{1}{\eta_j'^{(p)}} \right]^{-1}. \quad (1.41)$$

Для вычисления производной $\eta_j'^{(p)}$ используется разностная формула

$$\eta_j'^{(p)} \approx \frac{\eta_j^{(p)} - \eta_j^{(p-1)}}{r_{0j}^{3(p)} - r_{0j}^{3(p-1)}}. \quad (1.42)$$

Соотношение (1.40), соответствующее итерационному процессу ньютоновского типа, можно представить в виде действия некоторого нелинейного

Таблица 3 — Использованные расчётные параметры.

Обозначение	Расшифровка	Значение
N_r	Число шагов сетки по радиусу ячейки r	2048
N_k	Число шагов сетки по квазиимпульсу k	512
δ_{HFS}	Точность согласования атомного потенциала V	10^{-8}
δ_m	Точность согласования μ для смесей	10^{-7}

оператора A_m : $r_{0j}^{3(p+1)} = A_m r_{0j}^{3(p)}$. Значения радиусов ячеек, химических потенциалов и их производных по кубу радиуса ячейки при $p = 0$ задаются через заранее определенное начальное приближение. Если начальное приближение плохо согласуется с основной моделью расчёта самосогласованных потенциалов, то итерации (1.40) могут расходиться. Поэтому для улучшения сходимости используется линейная комбинация итераций:

$$r_{0j}^{3(p+1)} = (1 - \alpha_m) r_{0j}^{3(p)} + \alpha_m A_m r_{0j}^{3(p)}, \quad 0 \leq \alpha_m \leq 1. \quad (1.43)$$

Итерационный процесс останавливается при выполнении условия $|r_{0j}^{(p)}/r_{0j}^{(p-1)} - 1| < \delta_m$, $j = 1, \dots, N_m$ где δ_m — величина относительной погрешности согласования химических потенциалов смеси (смотри выбранное в работе значение в таблице 3). Окончательное значение для химического потенциала смеси задаётся как $\eta_m = Y_m^{(p)}$.

В настоящей работе, при проведении расчётов по моделям ТФ и ТФП начальные значения для радиусов ячеек и химических потенциалов элементов смеси берутся из модели постоянной плотности свободных электронов (ППСЭ) [28, с. 25], в которой электронная плотность внутри ячейки равна постоянной по пространству величине. В рамках этой модели парциальные плотности компонентов смеси не зависят от температуры вещества и выражаются как

$$\rho_j^{(0)} = \rho_m \left[\sum_{i=1}^{N_m} m_i \right]^{-1} \frac{A_{uj}}{Z_j} \sum_{i=1}^{N_m} m_i \frac{Z_i}{A_{ui}}, \quad (1.44)$$

где Z_j — заряд ядра j -го элемента.

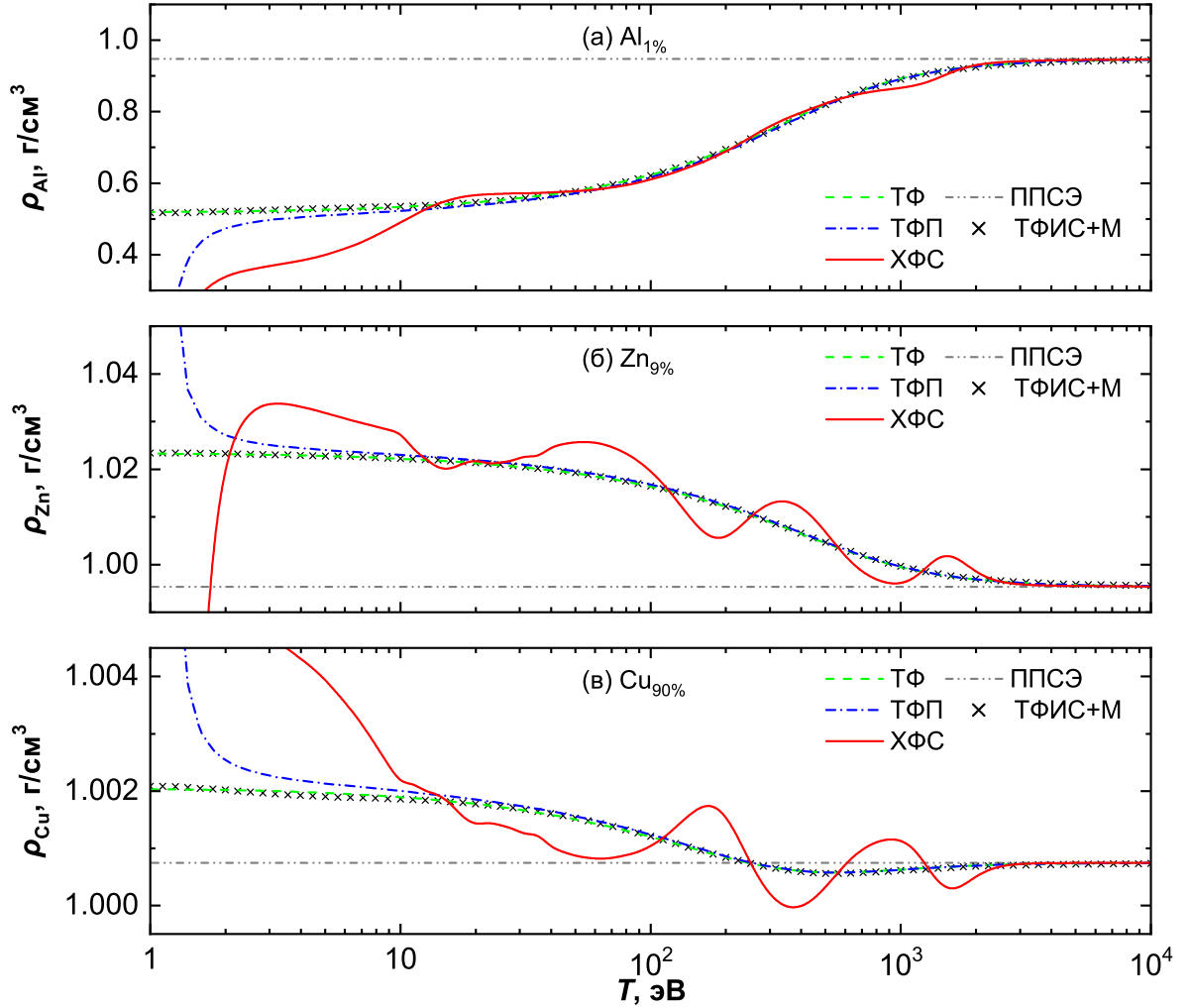


Рисунок 1.5 — Парциальные плотности ρ_j (а) алюминия, (б) цинка и (в) меди в латуни марки ЛА90-1 в зависимости от температуры T при постоянной плотности сплава $\rho_m = 1 \text{ г/см}^3$, рассчитанные по моделям ППСЭ, ТФ, ТФП и ХФС. Также приведены результаты расчётов [124] по квазиклассическому варианту модели Старрета–Саумона (ТФИС+М).

Используя аппроксимацию функции Ферми–Дирака можно выразить безразмерный химический потенциал по модели ППСЭ:

$$\eta_j^{(0)} \approx \frac{1}{2} \ln \frac{\pi}{6} - \frac{3}{2} \ln \left[\exp \sqrt[3]{\frac{2q_j^2}{3}} - 1 \right], \quad q_j = \frac{3\pi}{2} \frac{Z_j}{(2\theta)^{3/2} r_{0j}^3{}^{(0)}}. \quad (1.45)$$

Дифференцируя это выражение по $r_{0j}^3{}^{(0)}$ получим формулу для $\eta_j^{\prime(0)}$.

На рисунке 1.5 приведены результаты расчета парциальных плотностей компонентов смеси на примере латуни марки ЛА90-1 ($\text{Cu}_{0.9}\text{Zn}_{0.09}\text{Al}_{0.01}$) с общей плотностью $\rho_m = 1 \text{ г/см}^3$ [1]. Отсюда видно, что модель ППСЭ является неплохим начальным приближением для других рассмотренных моделей при

достаточно больших температурах ($T \gtrsim 1$ кэВ), когда парциальные плотности компонентов смеси практически перестают зависеть от T . При меньших значениях температуры модель ППСЭ является слишком грубым приближением, поэтому для расчётов самосогласованных потенциалов смесей по модели ХФС, которая чувствительна к выбору начального приближения, начальные значения (1.44) и (1.45) определяются с помощью предварительного расчёта по модели ТФ.

Для определения давления P_m и энергии E_m вещества, представляющего собой смесь химических элементов, используется приближение невзаимодействующих компонент. В рамках этого приближения, после согласования химических потенциалов, вычисляются значения давления P_j и энергии E_j каждой из компонент в отдельности. Для полного давления и удельной энергии используются аддитивные соотношения:

$$P_m = \sum_{j=1}^{N_m} \frac{m_j}{A_{uj}} P_j, \quad E_m = \left[\sum_{j=1}^{N_m} m_j \right]^{-1} \sum_{j=1}^{N_m} \frac{m_j}{A_{uj}} E_j. \quad (1.46)$$

Важно отметить, что уравнения моделей ОКП [108] и ЗТС [109] получены в приближении одинаковых частиц и в общем случае не применимы для описания термодинамических свойств ионной подсистемы веществ сложного химического состава. В связи с этим, в настоящей работе ионный вклад в давление P_j и энергию E_j для каждого j -го компонента учитывался только в приближении ИГ.

Описанный в разделе 1.3 алгоритм и результаты расчётов парциальных плотностей опубликованы в статье [1] и в докладах [7; 8; 12; 14; 16].

Глава 2. Результаты расчётов термодинамических зависимостей

2.1 Электронная теплоёмкость металлов

Одним из возможных вариантов получения состояний с высокой плотностью энергии является использование фемтосекундного лазерного излучения [120]. Облучение фемтосекундным лазерным импульсом практически мгновенно разогревает электроны металлических мишеней до высоких температур. При этом, так как передача энергии от электронов к ядрам происходит за относительно долгое время ($\gtrsim 1$ пс), температура ионной подсистемы остаётся сравнительно небольшой. Позже, в зависимости от интенсивности импульса, облученное вещество может расширяться и испытывать фазовые превращения. Обычно, для описания этих процессов используется двухтемпературное гидродинамическое моделирование [125]. Такие расчеты в том числе требуют знания теплоёмкости электронной подсистемы, которая отвечает за увеличение температуры электронов после поглощения излучения.

Используя термодинамические соотношения Максвелла [106, с. 74] можно выразить теплоёмкости вещества при постоянном объёме C_V и при постоянном давлении C_P через производные функций зависимости давления $P = P(\rho, T)$ и энергии $E = E(\rho, T)$ следующим образом:

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_\rho, \quad (2.1a)$$

$$C_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P = C_V + T \rho^{-2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^2 \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T^{-1}. \quad (2.1b)$$

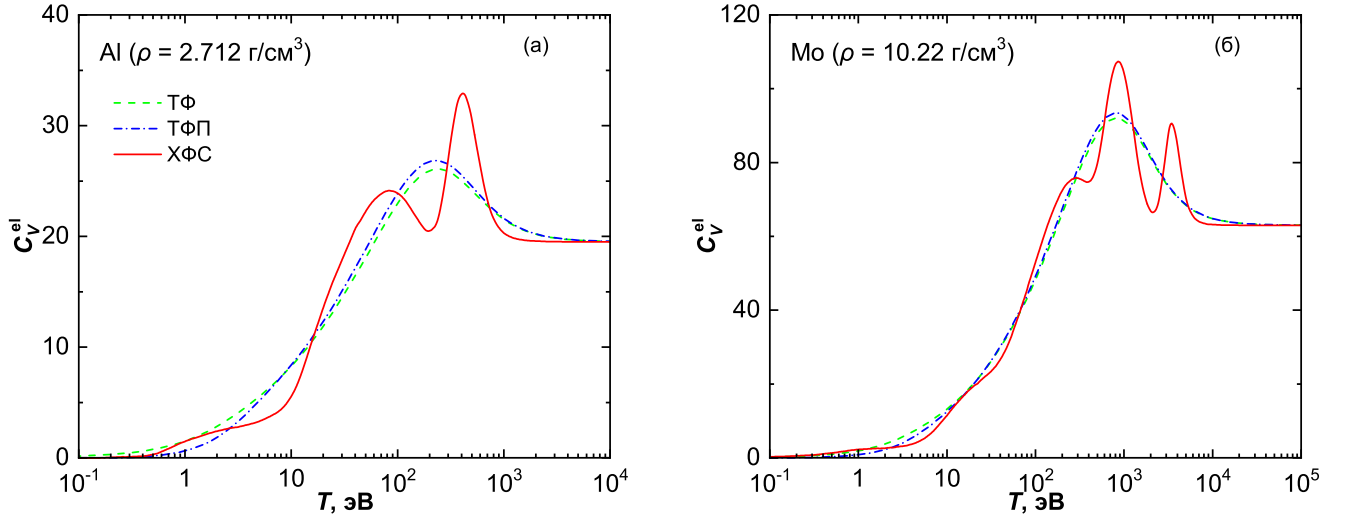


Рисунок 2.1 — Изохорическая теплоёмкость электронов C_V^{el} в зависимости от температуры T при постоянной плотности ρ для (а) алюминия ($\rho = 2.712 \text{ г/см}^3$) и (б) молибдена ($\rho = 10.22 \text{ г/см}^3$) согласно моделям ТФ, ТФП и ХФС.

Для вычисления производных можно воспользоваться разностной формулой вида

$$f'(x) \approx \frac{1}{5670h} \left[f(x-h) - 168f(x-\frac{h}{2}) + 5376f(x-\frac{h}{4}) - 32768f(x-\frac{h}{8}) + 32768f(x+\frac{h}{8}) - 5376f(x+\frac{h}{4}) + 168f(x+\frac{h}{2}) - f(x+h) \right], \quad (2.2)$$

которая имеет десятый порядок точности — погрешность $O(h^{10})$, где h — некоторая постоянная ($h > 0$).

На рисунках 2.1 и 2.2 представлены результаты расчётов теплоёмкостей электронной подсистемы при постоянном объёме $C_V^{\text{el}} = \theta(\partial S_e / \partial \theta)_V$ и постоянном давлении $C_P^{\text{el}} = \theta(\partial S_e / \partial \theta)_{P_e}$ (на один атом в атомной системе единиц) для алюминия и молибдена при нормальных плотностях в диапазоне от 0.1 эВ до температуры примерно соответствующей полной ионизации. Расчёты выполнены по моделям ТФ, ТФП и ХФС [26]. Кроме того, аналогичным образом был рассчитан показатель адиабаты электронной подсистемы $\gamma^{\text{el}} = C_P^{\text{el}} / C_V^{\text{el}}$ (смотри рисунок 1.2 в подразделе 1.1.3).

Из представленных результатов видно, что характер изменения теплоёмкости от низкотемпературного твердотельного предела (где $\gamma^{\text{el}} = 1$) до

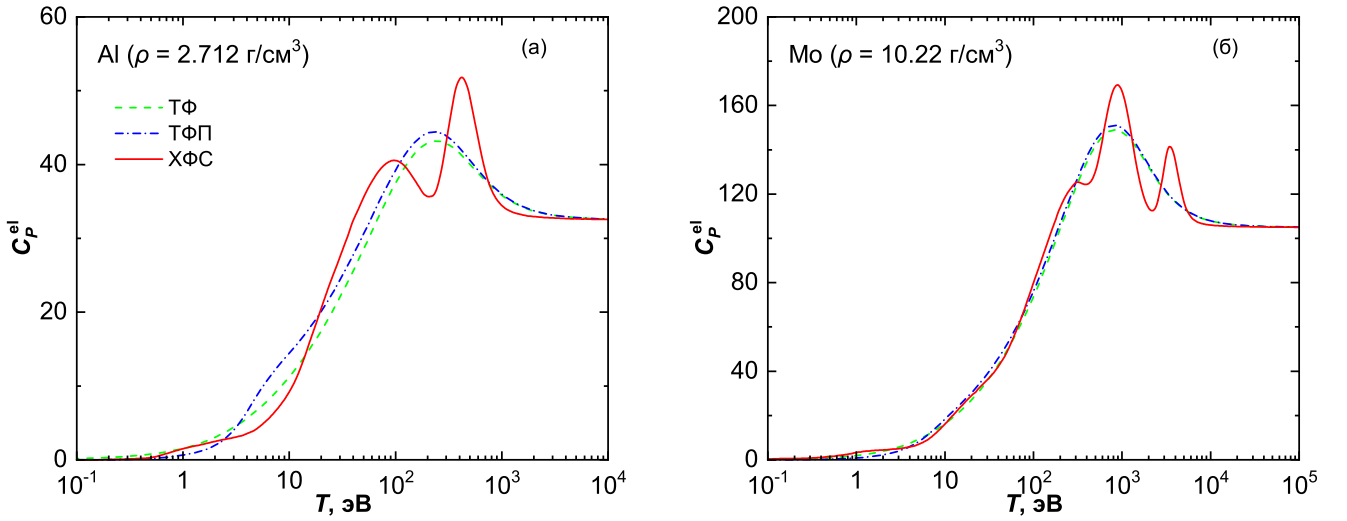


Рисунок 2.2 — Изобарическая теплоёмкость электронов C_P^{el} в зависимости от температуры T при постоянной плотности ρ для (а) алюминия ($\rho = 2.712 \text{ г/см}^3$) и (б) молибдена ($\rho = 10.22 \text{ г/см}^3$) согласно моделям ТФ, ТФП и ХФС.

высокотемпературного предела идеального газа (где $\gamma^{\text{el}} = 5/3$) является немонотонным для всех трёх рассмотренных квантово-статистических моделей. Более того, для зависимостей теплоёмкостей и показателя адиабаты рассчитанных по модели ХФС наблюдается осциллирующее поведение с несколькими локальными экстремумами.

Предполагая, что занимаемый мишенью объем практически не меняется во время процесса её нагрева фемтосекундным лазерным излучением, на практике, для оценки изменения электронной температуры при заданной величине поглощённой энергии достаточно знания изохорической теплоёмкости электронов C_V^{el} . На рисунке 2.3 представлены расчёты C_V^{el} по различным моделям в экспериментальном диапазоне температур вплоть до 15 эВ.

В области температур $T < 1 \text{ эВ}$ результаты расчёта по модели ТФ хорошо согласуются с результатами первопринципных расчётов в рамках теории функционала плотности (FP-LMTO и код VASP) [117]. Тем самым, достаточно простая в реализации модель ТФ даёт правильные асимптотики как для низких, так и для высоких температур. Сравнивая результаты модели ТФ с результатами полученными с помощью полуэмпирического уравнения состояния

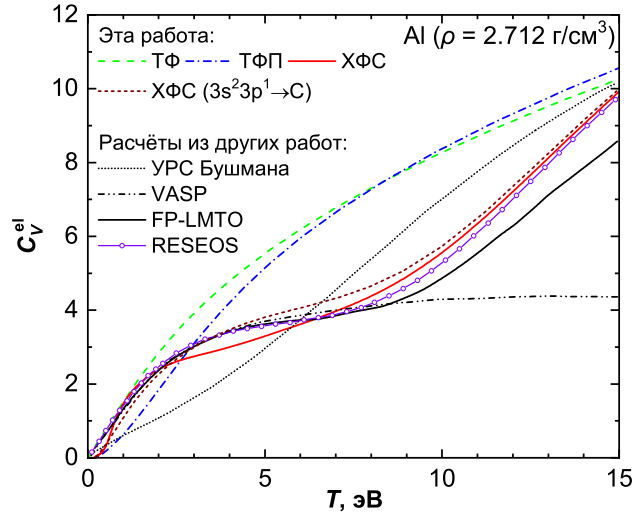


Рисунок 2.3 — Изохорическая теплоёмкость электронов C_V^{el} в зависимости от температуры T для алюминия при постоянной плотности $\rho = 2.712 \text{ г/см}^3$.

Расчёты проведены по моделям ТФ, ТФП и ХФС. Также приведены результаты расчётов других авторов полученные с помощью следующих методов: использование модели Либермана (код RESEOS) [120]; применение полноэлектронного (FP-LMTO) и псевдопотенциального (код VASP) подходов в рамках теории функционала плотности [117]; выражение для теплового вклада электронов, используемое в полуэмпирическом уравнении состояния алюминия (УРС Бушмана) [126].

алюминия (УРС Бушмана) [126], можно утверждать, что модель ТФ может стать более хорошим приближением для описания поведения теплового вклада электронов алюминия по сравнению с использованным в работе [126] приближением идеального Ферми-газа.

Для достаточно больших температур учёт квантовой и обменной поправок в рамках теории возмущений (модель ТФП) не сильно изменяет характер полученной по модели ТФ зависимости. Одновременно с этим, модель ТФП не даёт корректную асимптотику для низких температур. Это связано с неприемлемостью этой модели для $T \lesssim 1 \text{ эВ}$, так как уже при $T = 1 \text{ эВ}$ значение поправки к тепловой части энергии электронов сравнимо с значением основной величины, а именно $|\Delta E_{\text{eTF}}^{\theta} / E_{\text{eTF}}^{\theta}| \approx 0.72$, где $E_{\text{eTF}}^{\theta} = E_{\text{eTF}}(\rho, T) - E_{\text{eTF}}(\rho, 0)$.

Для температур $T \gtrsim 1 \text{ эВ}$ зависимость $C_V^{\text{el}}(T)$, рассчитанная по модели ХФС, имеет качественное сходство с результатом полученным с помощью пол-

ноэлектронного расчёта в рамках теории функционала плотности (FP-LMTO) [117]. В случае, если расчёт по модели ХФС проводился с принудительным отнесением валентных электронов алюминия ($3s^23p^1$) к непрерывному спектру (в регулярных расчётах эти состояния рассматривались квантово-механическим способом), то также наблюдается и количественное сходство этих моделей. Тем самым, в рамках задачи расчёта теплоёмкостных характеристик электронной подсистемы металлов, квантово-механические модели среднего атома, такие как модель ХФС или модель Либермана (код RESEOS) [120], могут служить альтернативой вычислительно более трудоемким методам теории функционала плотности.

Представленные в разделе 2.1 результаты опубликованы в статье [5] и в докладах [25—27].

2.2 Ударные адиабаты сплошных и пористых образцов металлов и смесей

Исследование ударной сжимаемости является удобным способом получения знаний об УРС различных типов веществ. Применение законов сохранения массы, импульса и энергии для описания изменения состояния вещества после его взаимодействия с ударной волной позволяет выразить термодинамические свойства вещества в форме однопараметрической кинематической зависимости $D = f(U)$, где U — массовая скорость, а D — скорость распространения ударной волны [127, с. 49—50].

Зная термодинамические параметры вещества в исходном состоянии, а именно плотность ρ_{00} , давление P_0 и внутреннюю энергию E_0 , соответствующие параметры ρ , P и E за фронтом ударной волны выражаются с помощью соотношений Гюгонио [127, с. 519]:

$$\rho = \frac{D\rho_{00}}{D-U}, \quad P = \rho_{00}DU + P_0, \quad E = \frac{1}{2}(P + P_0)\left(\frac{1}{\rho_{00}} - \frac{1}{\rho}\right) + E_0. \quad (2.3)$$

Отдельный интерес представляет изучение ударного сжатия пористых образцов. При тех же достижимых в ударной волне давлениях, пористые образцы испытывают больший нагрев по сравнению со сплошными образцами [127, с. 526]. Тем самым достигается область параметров, где более допустимо использовать приближения квантово-статистического подхода [53]. Для построения ударной адиабаты пористого образца соотношения (2.3) записываются относительно другой начальной плотности: $\rho_{00} = \rho_0/m_p$, где ρ_0 — нормальная плотность сплошного образца, m_p — степень пористости. Значения P_0 и E_0 задаются аналогично таковым у сплошного образца.

При очень высоких давлениях и температурах степень сжатия в ударной волне $\sigma = \rho/\rho_{00}$ перестаёт зависеть от величины давления и принимает асимптотическое значение

$$\sigma_{\text{lim}} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}, \quad (2.4)$$

где $\gamma = C_P/C_V$ [127, с. 51]. Стоит отметить, что в веществе при $T \gtrsim 1$ кэВ реализуются условия, когда необходимо учитывать вклад равновесного излучения в суммарную термодинамику вещества [115]. Тем не менее, этот эффект в настоящей работе не учитывается. Не учитывались также релятивистские эффекты, которые становятся важными при температуре $T \gtrsim 100$ кэВ [128]. При предельно высоких температурах электронный газ является однородным и идеальным, и вследствие того, что релятивистские эффекты не учитываются, выполняется $\gamma = 5/3$, $\sigma_{\text{lim}} = 4$.

Условно все методы измерения параметров ударного сжатия вещества можно разделить на абсолютные и относительные. Абсолютные методы основаны на одновременном независимом измерении каких либо двух параметров ударного сжатия (как правило это U и D), остальные параметры (ρ , P и E) находятся из соотношений (2.3). При применении относительных методов в исследуемом веществе измеряется только один из параметров, а для восстановления значений остальных используются дополнительные модельные

представления, в том числе знания о характеристиках ударного сжатия другого вещества используемого в качестве эталона.

В настоящем разделе представлены результаты расчётов ударных адиабат сплошных и пористых образцов алюминия (Al), железа (Fe), меди (Cu), молибдена (Mo) и диоксида кремния (SiO_2), осуществлённые в широком диапазоне давлений с помощью моделей ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС. Проведено сравнение результатов полученных четырёх комбинированных моделей (ТФП+ИГ, ТФП+ЗТС, ХФС+ИГ и ХФС+ЗТС) с экспериментальными данными по абсолютным измерениям сжимаемости образцов (сравнение результатов квантово-статистических расчётов с экспериментальными данными полученными с помощью относительных методов измерения приведено в разделе 2.4).

2.2.1 Алюминий

На сегодняшний день существует множество работ, экспериментальных [129—138] и теоретических [55; 111; 139—142], посвящённых исследованию ударно-волновых свойств алюминия в широком диапазоне параметров. В этом отношении алюминий является одним из наиболее широко исследованных металлов, и его удобно использовать для сопоставления моделей уравнений состояния. Кроме того, заряд ядра алюминия относительно невелик ($Z = 13$), и тем самым, в этом случае для описания состояний расположенных на внутренних оболочках электронов оправдано использование нерелятивистских уравнений.

На рисунке 2.4 представлены результаты расчётов основной ударной адиабаты алюминия ($\rho_{00} = \rho_0 = 2.712 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -12.1 \text{ кДж/г}$) при различных способах учёта электронного и ионного вкладов в УРС. Здесь, в области максимально достижимых степеней сжатия (где $\sigma > \sigma_{\text{lim}}$, при давле-

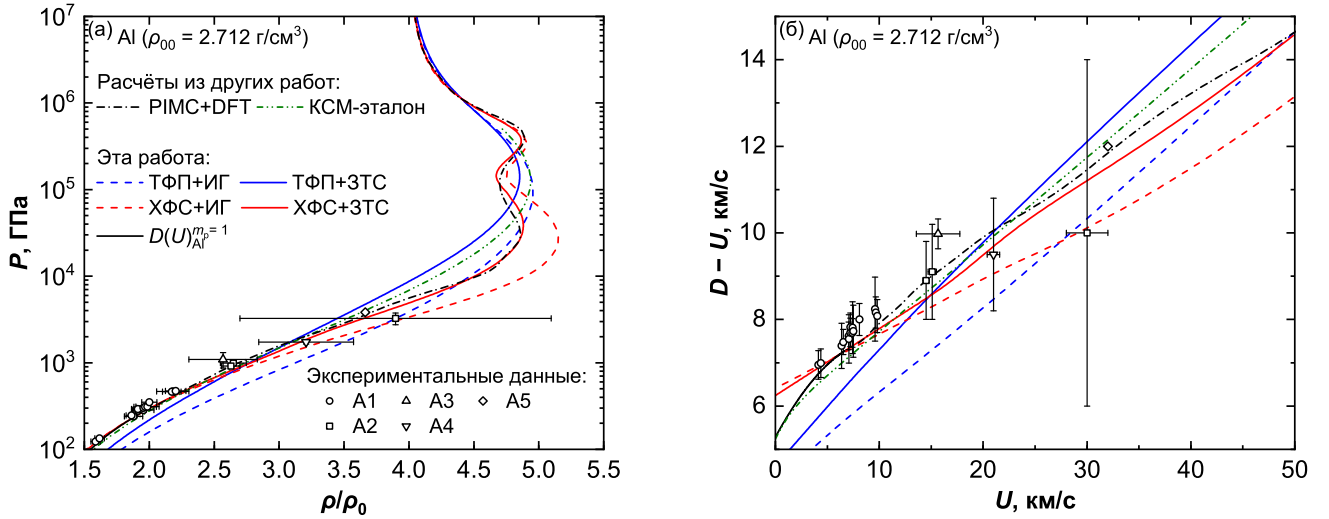


Рисунок 2.4 — Ударные адиабаты сплошных образцов алюминия ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 2.712 \text{ г/см}^3$), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными (A1—[129], A2—[130], A3—[131], A4—[132], A5—[133]), с результатами первопринципных расчётов (PIMC+DFT-MD—[142]), с полуэмпирической аппроксимацией на основе квантово-статистической модели атома (КСМ-эталон—[55]) и с полуэмпирической аппроксимацией на основе модели ХФС+ЗТС ($D(U)_{\text{Al}}^{m_p=1}$ —уравнение (2.5)).

ниях $P \sim 10\text{--}1000 \text{ ТПа}$), можно наблюдать качественно различное поведение ударных адиабат полученных по моделям ХФС и ТФП, заключающиеся в осцилляциях значений σ по модели ХФС относительно значений σ по модели ТФП. Осциллирующий вид ударной адиабаты рассчитанной по модели ХФС связан с последовательной ионизацией электронных оболочек при возрастании температуры, тогда как модель ТФП не учитывает оболочечную структуру атома. Тем не менее, в области влияния оболочечных эффектов на положение ударной адиабаты алюминия, нет достаточного количества надёжных абсолютных измерений, которые позволили бы экспериментально подтвердить наличие этих осцилляций с необходимой точностью ($\Delta D/D \lesssim 0.005$) [2]. При этом важно отметить, что в отличие от других рассмотренных моделей, модель ХФС+ЗТС даёт осцилляции близкие к результатам первопринципных расчётов, которые

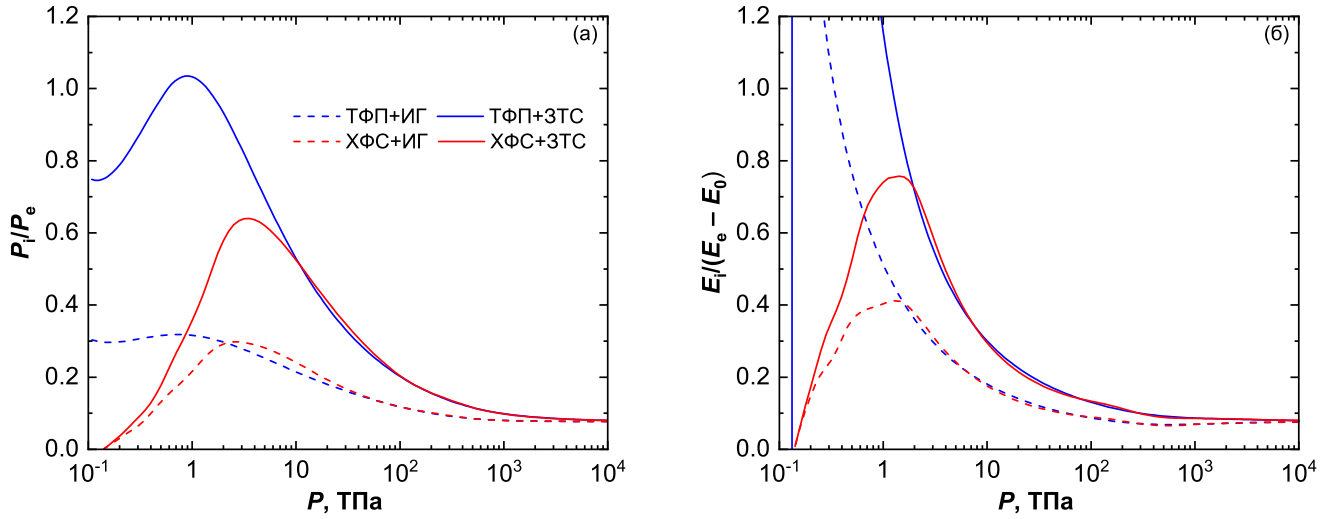


Рисунок 2.5 — Отношение ионного и электронного вкладов в величину (а) давления и (б) внутренней энергии на ударной адиабате сплошного образца алюминия согласно моделям ТФП (синие кривые) и ХФС (красные кривые) с учётом ионной подсистемы по моделям ИГ (штриховые кривые) и ЗТС (сплошные кривые).

были проведены с помощью комбинации квантового метода Монте-Карло с методом квантовой молекулярной динамики (PIMC+DFT-MD) [142].

При давлениях $P \sim 1\text{--}10$ ТПа абсолютные измерения ударной сжимаемости могут быть осуществлены с помощью метода γ -репера, который основывается на использовании сильных потоков излучения, характерных для ядерных взрывов [131]. Но этот метод связан с более высокой погрешностью измерения по сравнению с методами, применяемые при низких давлениях. Хотя погрешность экспериментальных данных [130–133], полученных методом γ -репера, не позволяет выбрать лучшую модель в рассмотренном диапазоне параметров, результаты модели ТФП+ИГ наиболее сильно отклоняются от средних значений экспериментальных данных. Кроме того, в этом диапазоне давлений определяющую роль играет выбор модели учёта вклада ионов в термодинамику, так как значения давлений (и энергий) электронной и ионной подсистем становятся сравнимы друг с другом (смотри рисунок 2.5). Тем самым, при расчётах по модели ЗТС в этой области параметров для зависимостей $P(T, \rho)$ и $E(T, \rho)$ может наблюдаться значимое отклонение от условия

термодинамического согласия, что, в свою очередь, влияет на достоверность определения положения ударной адиабаты.

Для диапазона давлений $P \sim 0.1\text{--}1$ ТПа доступны экспериментальные данные полученные квази-абсолютным способом [129]. В этом диапазоне модель ХФС имеет лучшее согласие с экспериментальными данными по сравнению с моделью ТФП независимо от способа учёта ионной подсистемы.

В области давлений $P \lesssim 0.1$ ТПа ударная сжимаемость сплошных образцов алюминия была достаточно надёжно экспериментально определена [143]. При этом ни одна из рассмотренных моделей не описывает экспериментальные данные [134; 137; 138; 144] для этого диапазона, и, в частности, не согласуется с полуэмпирической зависимостью из работы [55] (КСМ-эталон), чей нижний участок получен на основе обработки большого массива экспериментальных данных по динамическому и статическому сжатию сплошных образцов алюминия. Эта несогласованность связана с неприменимостью ячеечного приближения среднего атома при относительно низкой температуре вещества.

В настоящей работе, для оценки области применимости ударной адиабаты сплошных образцов алюминия, рассчитанной по модели ХФС+ЗТС, на основе этой модели была построена полуэмпирическая зависимость вида

$$D_{\text{Al}} = A_0 + A_1 U_{\text{Al}} + A_2 U_{\text{Al}}^2, \quad 0 \leq U_{\text{Al}} \leq U^*, \quad (2.5)$$

где $A_0 = 5.2828$ км/с, $A_1 = 1.442$, $A_2 = -0.021524$ с/км, $U^* = 6.6855$ км/с (с давлением $P_{\text{Al}} = P^* = 253.13$ ГПа при скорости $U_{\text{Al}} = U^*$). Коэффициенты для этой зависимости подобраны таким образом, чтобы наилучшим образом описывать экспериментальные данные [129; 134; 137; 138; 143; 144]. Одновременно с этим требовалось выполнение условия гладкого перехода этой зависимости в расчётную кривую по модели ХФС+ЗТС в некоторой точке сшивки U^* . Тем самым, предложен ударно-волновой эталон для алюминия, где для давлений $P \leq P^*$ выполняется соотношение (2.5), а для давлений $P > P^*$ применимы результаты расчёта по модели ХФС+ЗТС (смотри значения σ от P в таблице А.1, приложение А). В отличие от ударно-волнового эталона алюминия

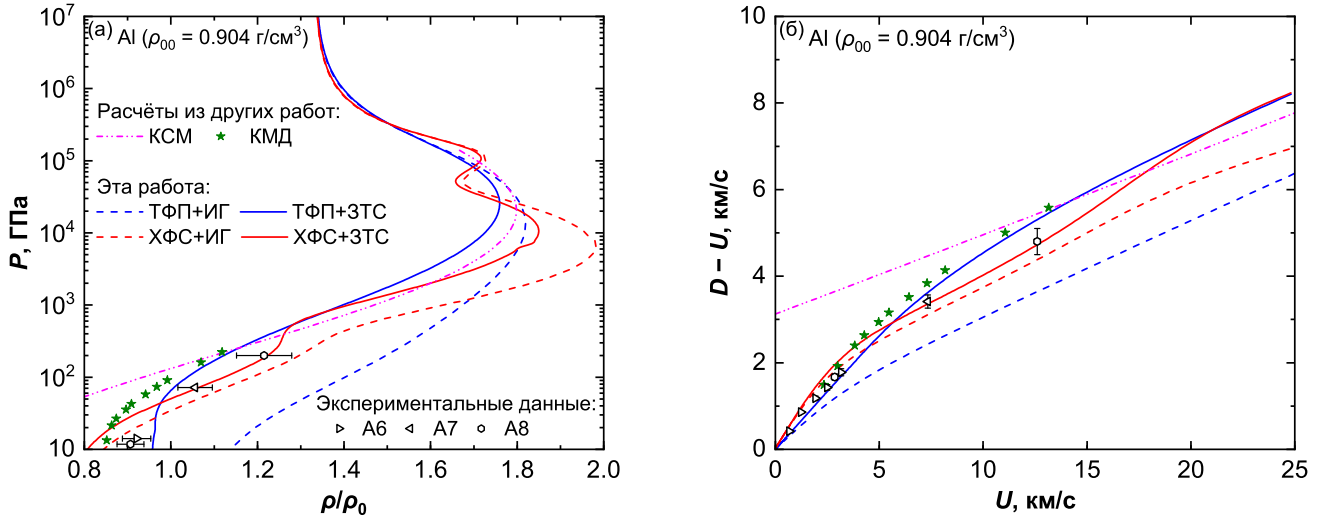


Рисунок 2.6 — Ударные адиабаты пористых образцов алюминия ($m_p = 3$, $\rho_{00} = 0.904 \text{ г/см}^3$), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными (А6—[136], А7—[143], А8—[135]), с результатами расчётов по методу квантовой молекулярной динамики (КМД—[141]) и с аппроксимацией на основе квантово-статистической модели атома (КСМ—[53]).

представленного в работе [55], предложенный выше эталон учитывает оболочечные эффекты и имеет хорошее согласие с результатами первопринципных расчётов [142].

Результаты расчётов ударных адиабат образцов алюминия со степенью пористости $m_p = 3$ по различным моделям представлены на рисунке 2.6. Следует отметить, что для больших степеней пористости образцов, влияние выбора модели учёта ионного вклада будет решающим, начиная с меньших давлений. Сравнение моделей показывает, что лучшее согласие с экспериментальными данными [135; 143] даёт модель ХФС+ЗТС. Причём в отличие от ударной адиабаты сплошных образцов, осцилляционное поведение кривой по модели ХФС проявляется уже при относительно небольших давлениях ($P \gtrsim 0.1 \text{ ТПа}$).

На примере ударной адиабаты алюминия также исследовалось влияние способа выбора величины энергии эффективной границы непрерывного спектра ϵ_0 на результаты расчётов по модели ХФС+ЗТС. Для выбора этой величины решается уравнение (1.15). Но возникает неоднозначность, из-за того, что это

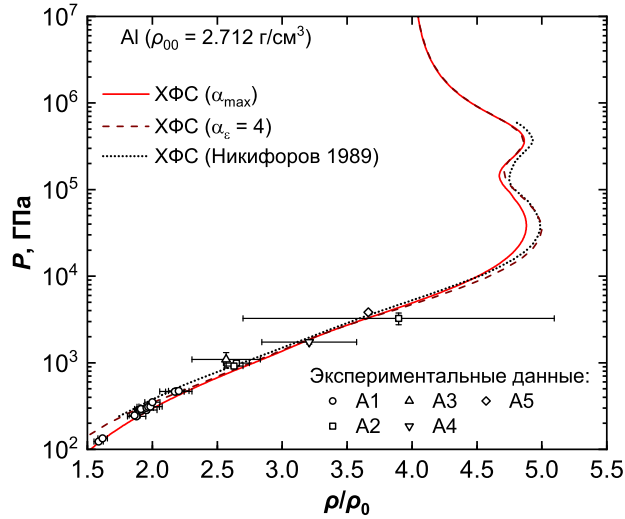


Рисунок 2.7 — Ударные адиабаты сплошных образцов алюминия ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 2.712 \text{ г/см}^3$), рассчитанные по модели ХФС с учётом ионного вклада по модели ЗТС для оптимального наибольшего значения ϵ_0 (α_{\max}) и для фиксированного номера корня уравнения (1.15) ($\alpha_\epsilon = 4$). Приведено сравнение с расчётами из работы [111] (Никифоров 1989) и с экспериментальными данными (смотри обозначения в подписи к рисунку 2.4).

уравнение имеет несколько решений. В подразделе 1.1.2 описан алгоритм для выбора номера корня, который использовался во всех расчётах настоящей работы, заключающийся в выборе оптимального наибольшего значения для ϵ_0 (регулярные расчёты при $\alpha = \alpha_{\max}$). При этом в работах прочих авторов используются и другие подходы. В частности, в работах [28; 111] при проведении широкодиапазонных расчётов предложено зафиксировать номер корня α_ϵ уравнения (1.15), так, чтобы значение ϵ_0 при $T = 0$, $\rho = \rho_0$ лежало в зоне проводимости. Для алюминия этот подход даёт значение $\alpha_\epsilon = 4$, равное числу полностью заполненных электронных оболочек.

На рисунке 2.7 представлены результаты расчётов ударной адиабаты сплошных образцов алюминия по модели ХФС+ЗТС для оптимального наибольшего значения ϵ_0 (α_{\max}) и для фиксированного номера корня уравнения (1.15) ($\alpha_\epsilon = 4$). Здесь видно, что дополнительный учёт уровней квантово-механическим способом ведёт к более жёсткому ходу ударной адиабаты. Кроме того, удалось получить удовлетворительное согласие с результатами работы [111].

Представленные в подразделе 2.2.1 результаты опубликованы в статьях [2; 6] и в докладах [18; 19; 22; 23; 25].

2.2.2 Железо

Железо является широко распространённым компонентом в различных конструкционных материалах, в том числе подвергающихся интенсивным тепловым и силовым нагрузкам. Важной технической задачей является предсказание поведения подобных материалов при экстремальных условиях, реализующихся, в частности, при воздействии ударных волн с высокой интенсивностью $P \gtrsim 0.5$ ТПа. Как правило, в этой области давлений имеющиеся экспериментальные данные обладают достаточно большой погрешностью. Поэтому для описания ударно-волновых свойств железа в этой области необходимо использовать теоретические представления.

В настоящей работе, аналогично полученной зависимости (2.5) для алюминия, для ударной адиабаты сплошных образцов железа была получена зависимость вида

$$D_{\text{Fe}} = A_0 + A_1 U_{\text{Fe}} + A_2 U_{\text{Fe}}^2, \quad 0 \leq U_{\text{Fe}} \leq U^* \quad (2.6)$$

с коэффициентами $A_0 = 3.6723$ км/с, $A_1 = 1.7943$, $A_2 = -0.03948$ с/км, $U^* = 5.7262$ км/с (с давлением $P_{\text{Fe}} = P^* = 568.72$ ГПа при скорости $U_{\text{Fe}} = U^*$), наилучшим образом описывающая экспериментальные данные [134; 145–152] и гладко переходящая в расчётную зависимость по модели ХФС+ЗТС при $U = U^*$. Эта зависимость представлена на рисунке 2.8, где также представлены результаты расчётов основной ударной адиабаты железа ($\rho_{00} = \rho_0 = 7.85$ г/см³, $P_0 = 0.1$ МПа, $E_0 = -7.452$ кДж/г) по моделям ТФП+ИГ, ТФП+ЗТС, ХФС+ИГ и ХФС+ЗТС.

При анализе полученной по модели ТФП ударной адиабаты важно определить величину давления, ниже которого значение поправок к энергии и

Таблица 4 — Значение полного давления на ударной адиабате железа полученной по модели ТФП, при котором для электронного вклада выполняется условие $\Delta P_{\text{TFC}}/P_{\text{TF}} = 0.5$. Результаты приведены для различных начальных плотностей образцов и способов учёта ионного вклада.

ρ_{00} , г/см ³	$P_{\text{TFC+IG}}$, ТПа	$P_{\text{TFC+CHS}}$, ТПа
7.85	2.4966	3.125
4.3	1.9141	2.4284

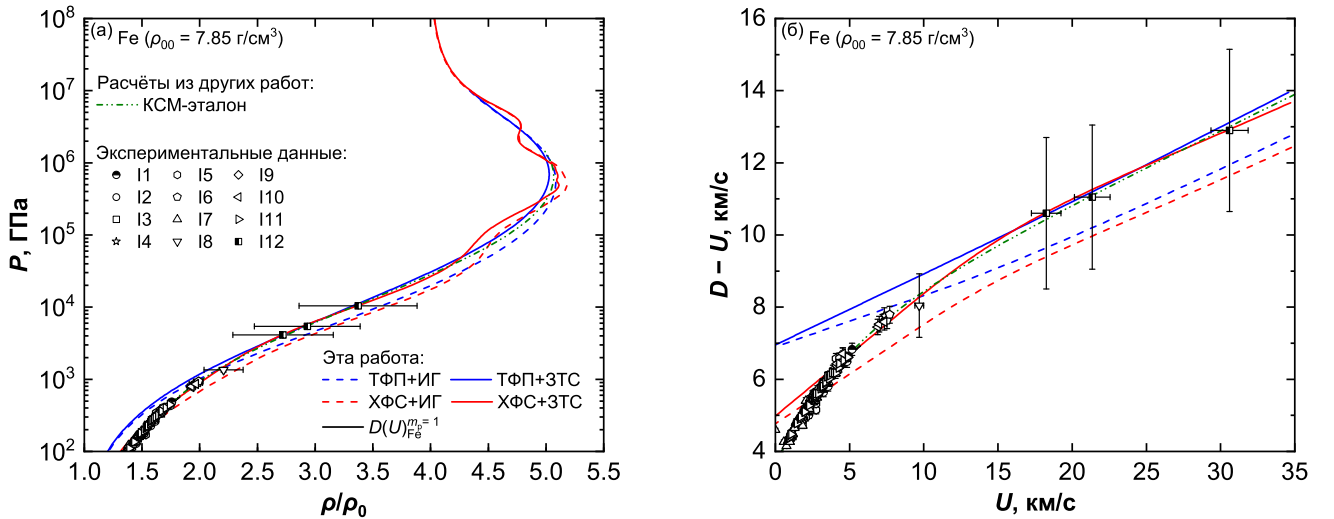


Рисунок 2.8 — Ударные адиабаты сплошных образцов железа ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 7.85 \text{ г/см}^3$), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U .

Приведено сравнение с экспериментальными данными (I1—[146], I2—[134], I3—[147], I4—[153], I5—[148], I6—[154], I7—[149], I8—[137], I9—[150], I10—[151], I11—[152], I12—[155]), с полуэмпирической аппроксимацией на основе

квантово-статистической модели атома (КСМ-эталон—[55]) и с полуэмпирической аппроксимацией на основе модели ХФС+ЗТС

$$(D(U)_{\text{Fe}}^{m_p=1} \text{—уравнение (2.6)}).$$

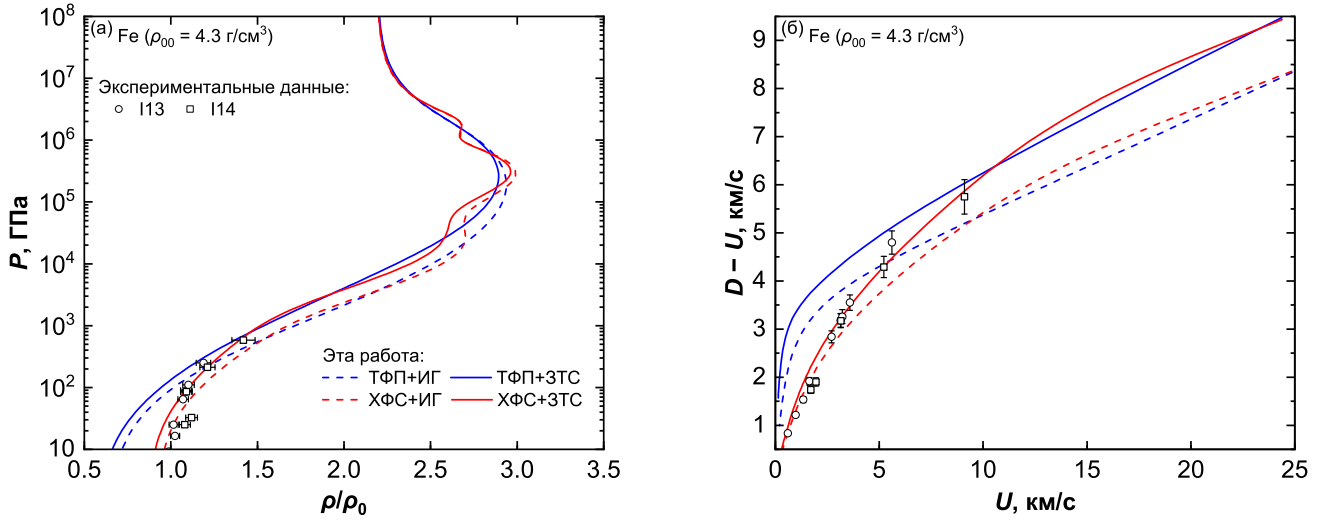


Рисунок 2.9 — Ударные адиабаты пористого образца железа ($m_p \approx 1.8256$, $\rho_{00} = 4.3 \text{ г/см}^3$) рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными (I13—[156], I14—[157]).

давлению сравнимы с полученными по модели ТФ основными величинами, и тем самым найти область применимости модели ТФП. В таблице 4 для различных моделей ионной части и начальных плотностей образцов железа приведены значения давлений, для которых на ударной адиабате выполняется условие $\Delta P_{\text{TFC}}/P_{\text{TF}} = 0.5$. Отсюда видно, что в области применимости модели ТФП результаты расчётов независимо от способа учёта ионного вклада не противоречат доступным экспериментальным данным [155], тогда как в области, где не выполняется условие на малость поправки, модель ТФП не описывает экспериментальные данные [134; 145—152; 154].

Среди всех четырёх рассмотренных моделей, наибольшей областью согласия с экспериментальными данными обладает модель ХФС+ЗТС. Рассчитанная по этой модели ударная адиабата для сплошных образцов железа согласуется с экспериментальными данными [134; 137; 146; 148; 150—152; 154; 155] при давлениях $P \gtrsim 0.3 \text{ ТПа}$ (смотри рисунок 2.8), а для образцов с начальной плотностью $\rho_{00} = 4.3 \text{ г/см}^3$ с экспериментальными данными [156; 157] при давлениях $P \gtrsim 0.05 \text{ ТПа}$ (смотри рисунок 2.9).

Представленные в подразделе 2.2.2 результаты опубликованы в статье [3] и в докладах [13; 17–19].

2.2.3 Медь

Медь, наравне с алюминием, железом, свинцом и молибденом, является одним из материалов, который широко используется в качестве ударно-волнового стандарта [158]. В то же время, медь обладает некоторыми преимуществами по сравнению с большинством из перечисленных выше веществ. В частности, даже при слабых соударениях, относительно высокая пластичность меди приводит к возникновению именно ударной волны без предшествующей ей волны упругого сжатия [159; 160]. Кроме того, при нормальных условиях медь обладает плотноупакованной гранецентрированной кубической решеткой, и поэтому при сжатии не испытывает полиморфных превращений [161]. При плавлении скачок плотности меди относительно мал [162].

Знание термодинамических свойств меди при экстремальных условиях является важной технической задачей. В частности, в экспериментах [163] медь (наравне с алюминием) используется в качестве материала ударника, ускоряемого до предельных скоростей ≈ 22 км/с. При столкновении ударника на этих скоростях с неподвижной медной мишенью соответствующее давление в образовавшейся ударной волне будет $P \approx 2$ ТПа.

На сегодняшний день экспериментальное положение ударной адиабаты сплошных образцов меди достаточно надёжно определено при давлениях $P < 0.5$ ТПа [138; 158; 164]. Для больших давлений имеющиеся экспериментальные данные как правило обладают недостаточной точностью, противоречат друг другу или были получены с помощью относительных методов измерений. Всё это делает невозможным однозначно определить экспериментальное положение ударной адиабаты в этом регионе. И для уточнения термодинамических свойств

меди в верхней экспериментальной области ($0.5 < P \lesssim 20$ ТПа), а также для получения информации об УРС при еще более высоких давлениях, в настоящей работе используются квантово-статистические расчёты.

Ударные адиабаты сплошных ($\rho_{00} = \rho_0 = 8.93$ г/см³, $P_0 = 0.1$ МПа, $E_0 = -5.324$ кДж/г) и пористых ($m_p = 4$, $\rho_{00} = \rho_0/m_p = 2.2325$ г/см³) образцов меди для различных комбинаций моделей учёта электронного и ионного вкладов в УРС представлены на рисунках 2.10 и 2.11 соответственно. Среди всех представленных моделей в целом наиболее близкий к экспериментальным данным результат при давлениях $P \lesssim 1$ ТПа даёт модель ХФС+ЗТС. Но в то же время стоит отметить, что результаты полученные с помощью модели ТФП+ИГ не противоречат доступным экспериментальным данным [135; 156; 157; 165] при давлениях $P \gtrsim 1$ ТПа для сплошных ($m_p = 1$) образцов и при давлениях $P \gtrsim 0.1$ ТПа для пористых ($m_p = 4$) образцов.

При построении аппроксимации, которая наилучшим образом описывает экспериментальные данные [134; 149; 153; 165; 166] и гладко переходит в теоретическую зависимость полученную по модели ХФС+ЗТС (смотри значения P от σ в приложении А в таблице А.5), в отличие от случаев алюминия и железа, для меди подбирались коэффициенты A_0 – A_3 и значение U^* к зависимости, имеющей вид кубического полинома:

$$D_{\text{Cu}} = A_0 + A_1 U_{\text{Cu}} + A_2 U_{\text{Cu}}^2 + A_3 U_{\text{Cu}}^3, \quad 0 \leq U_{\text{Cu}} \leq U^*. \quad (2.7)$$

Используя метод минимизации среднеквадратичного отклонения, для этого вида зависимости были получены следующие значения коэффициентов: $A_0 = 3.87088$ км/с, $A_1 = 1.56335$, $A_2 = -0.0191997$ с/км, $A_3 = 3.36443 \times 10^{-4}$ с²/км². Аналогичным образом получено оптимальное значение массовой скорости в точке сшивки $U^* = 22.0704$ км/с, которое соответствует давлению на ударной адиабате $P^* = 6.43284$ ТПа.

Представленные в подразделе 2.2.3 результаты опубликованы в статье [4] и в докладах [20; 22; 23].

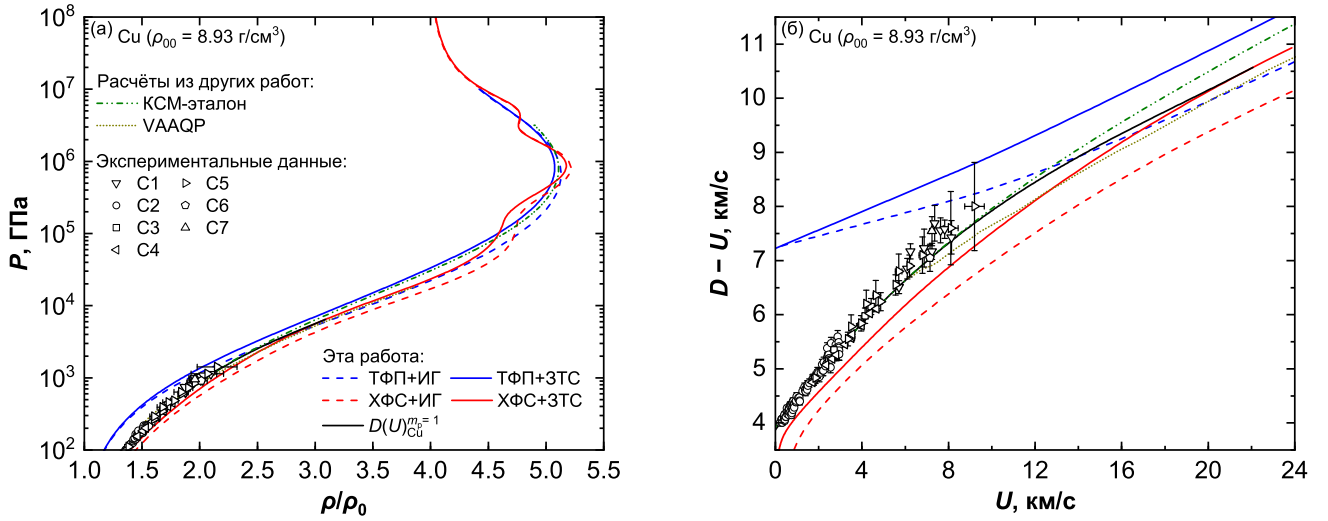


Рисунок 2.10 — Ударные адиабаты сплошных образцов меди ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 8.93 \text{ г/см}^3$), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными (С1—[167], С2—[149], С3—[134], С4—[166], С5—[165], С6—[153], С7—[135]), с полуэмпирической аппроксимацией на основе квантово-статистической модели атома (КСМ-эталон—[55]), с расчётом по модели вариационного среднего атома в квантовой плазме (VAAQP—[99]) и с полуэмпирической аппроксимацией на основе модели ХФС+ЗТС ($D(U)_{\text{Cu}}^{m_p=1}$ —уравнение (2.7)).

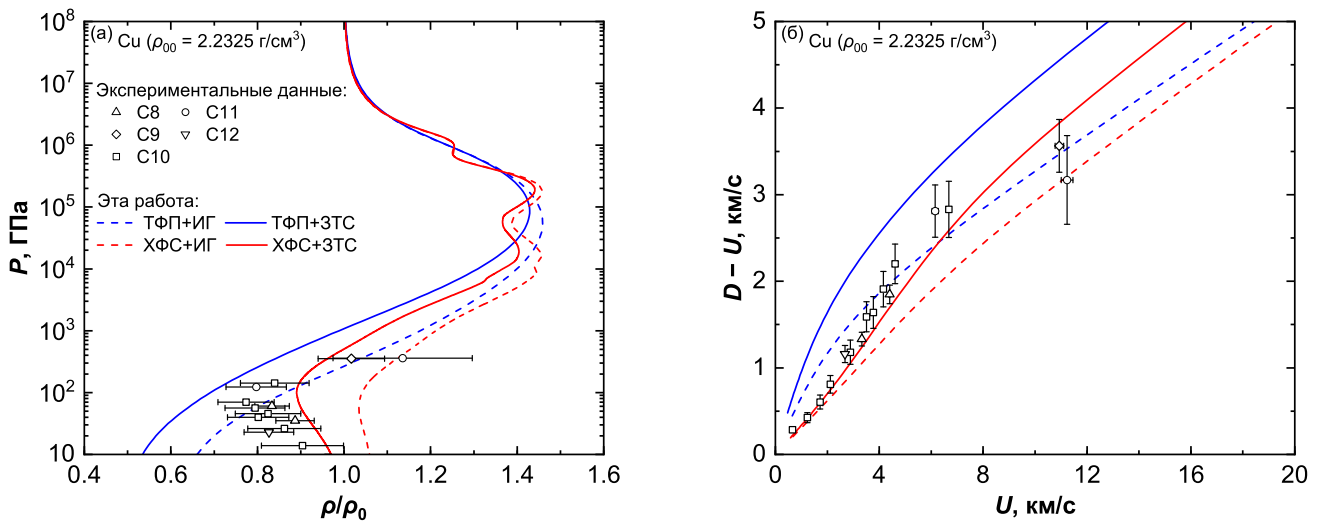


Рисунок 2.11 — Ударные адиабаты пористого образца меди ($m_p = 4$, $\rho_{00} = 2.2325 \text{ г/см}^3$) рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными (С8—[149], С9—[135], С10—[156], С11—[157], С12—[158]).

2.2.4 Молибден

Молибден является переходным металлом, который имеет различные технологические применения. В частности, молибден используется в качестве ударно-волнового стандарта в экспериментах по ударному сжатию [168; 169] и в качестве стандарта внутреннего давления в экспериментах по статическому сжатию в алмазных наковальнях [170]. Таким образом, важно знать структуру и поведение молибдена в широком диапазоне параметров, в том числе при параметрах соответствующих состоянию плотной плазмы.

В настоящей работе, модели ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС используются для расчёта ударной адиабаты сплошных образцов молибдена ($\rho_{00} = \rho_0 = 10.22 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -6.856 \text{ кДж/г}$) в диапазоне давлений от 1 до 10^5 ТПа . Этот диапазон включает в себя область максимального проявления оболочечных эффектов ($\sim 10^2\text{--}10^4 \text{ ТПа}$) на ударной адиабате и область полной ионизации ($\sim 10^5 \text{ ТПа}$), где электронный и ионный газы почти однородны и идеальны. При давлениях $P \lesssim 1 \text{ ТПа}$ нет достаточных оснований применять приближения, используемые в этих моделях, но, тем не менее, результаты квантово-статистических расчётов могут послужить основой для построения полуэмпирических широкодиапазонных уравнений состояний в этой области параметров.

На сегодняшний день в области давлений до 0.5 ТПа положение ударной адиабаты молибдена достаточно надёжно определено экспериментально. В данной работе с помощью доступных экспериментальных данных [137; 145; 147; 149; 154; 171—174] была получена следующая зависимость волновой скорости D от массовой скорости U на ударной адиабате сплошного образца молибдена:

$$D_{\text{Mo}} = A_0 + A_1 U_{\text{Mo}} + A_2 U_{\text{Mo}}^2 + A_3 U_{\text{Mo}}^3, \quad 0 \leq U_{\text{Mo}} \leq U^*, \quad (2.8)$$

где $A_0 = 5.07227 \text{ км/с}$, $A_1 = 1.32019$, $A_2 = -0.0155336 \text{ с/км}$, $A_3 = 5.80655 \times 10^{-4} \text{ с}^2/\text{км}^2$. В точке $U = U^* = 12.6947 \text{ км/с}$ (при $P = P^* = 2.66176 \text{ ТПа}$) эта

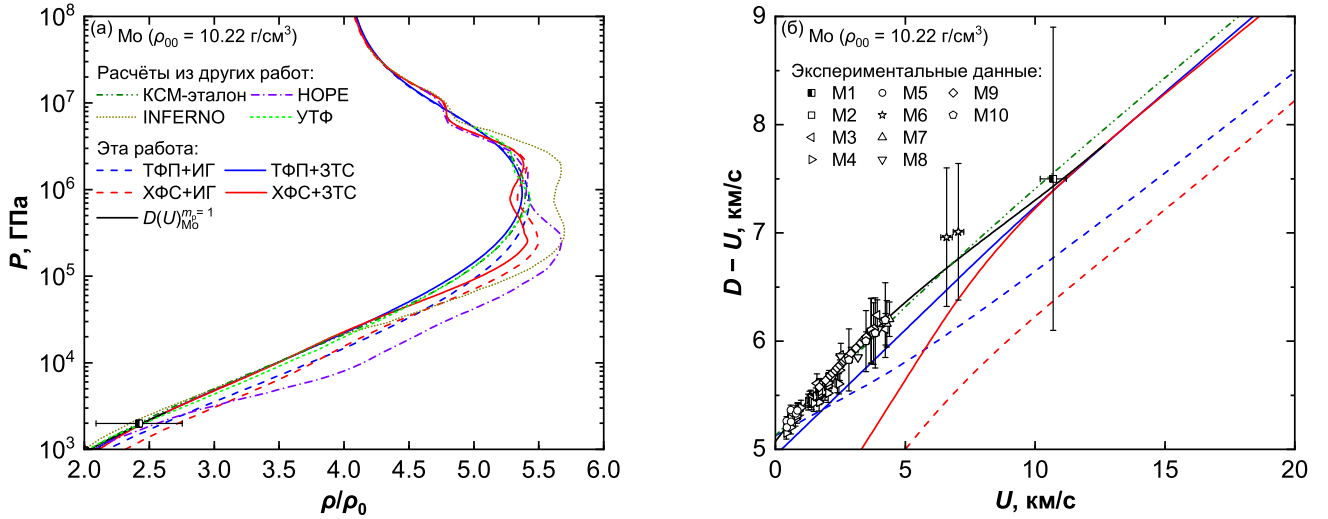


Рисунок 2.12 — Ударные адиабаты сплошных образцов молибдена ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 10.22 \text{ г/см}^3$), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными (M1—[171], M2—[147], M3—[154], M4—[149], M5—[145], M6—[137], M7—[172], M8—[173], M9—[174], M10—[175]), с полуэмпирической аппроксимацией на основе квантово-статистической модели атома (КСМ-эталон—[55]), с расчётом по модели Либермана (INFERNO—[80]), с расчётом по самосогласованной модели Дирака–Слэтера (НОРЕ—[80]), с расчётом по усовершенствованной модели Томаса–Ферми (УТФ—[63]) и с полуэмпирической аппроксимацией на основе модели ХФС+ЗТС ($D(U)_{\text{Mo}}^{m_p=1}$ —уравнение (2.8)).

зависимость гладко переходит в расчётную зависимость по модели ХФС+ЗТС (рисунок 2.12(б)).

На рисунке 2.12(а) приведено сравнение результатов расчётов ударной адиабаты молибдена, выполненных с помощью различных квантово-статистических моделей: ТФП, ХФС, НОРЕ [80], INFERNO [80] и УТФ [63]. Здесь видно, что модель ХФС+ЗТС даёт наименьшее значение максимально достижимой степени сжатия $\sigma_{\text{max}} \approx 5.412$ (смотри таблицу А.7 в приложении А) по сравнению с другими рассмотренными квантово-статистическими моделями. Кроме того, показано, что при $P \sim 10^3$ ТПа наблюдаемая амплитуда осцилляций значений степени сжатия полученных по модели ХФС относительно значений полученных по модели ТФП близка по абсолютному значению к аналогичной

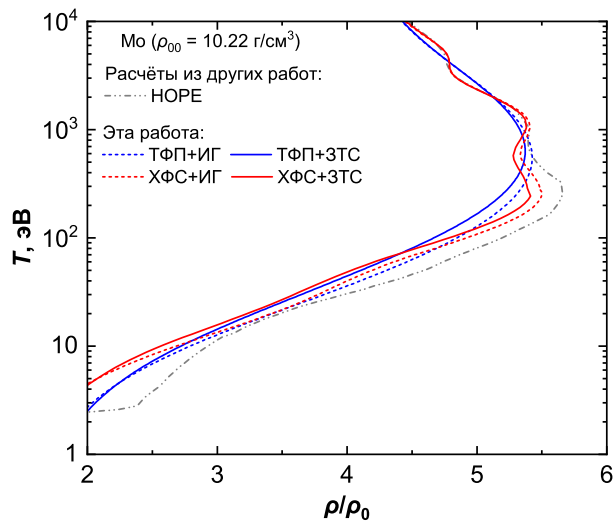


Рисунок 2.13 — Температура на ударной адиабате сплошного образца молибдена ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 10.22$ г/см³) рассчитанная по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в зависимости от степени сжатия. Приведено сравнение с результатом по самосогласованной модели Дирака–Слэтера (НОРЕ—[80]).

амплитуде осцилляций наблюдаемых в модели УТФ. Но при давлении, в котором в модели УТФ достигается максимальная степень сжатия, в модели ХФС в то же время наблюдается локальный минимум значения степени сжатия. Тем не менее, в области максимально достижимых степеней сжатия отсутствуют экспериментальные данные, которые бы позволили выбрать лучшую модель учёта оболочечных эффектов или хотя бы подтвердить реальное наличие осцилляционного поведения. При меньших давлениях ($P \approx 2$ ТПа), все рассмотренные модели не противоречат экспериментальным данными из работы [171].

Важно отметить, что хотя модели ТФП+ЗТС и ХФС+ЗТС дают близкие результаты при $P = 1\text{--}30$ ТПа в координатах $P\text{--}\rho/\rho_0$, но, в то же время соответствующие температуры на ударных адиабатах отличаются больше чем на 100% (смотри рисунок 2.13). Следует отметить, что обычное измерение ударно-волновых параметров даёт информацию только о калорическом УРС. Для экспериментальной проверки теоретических моделей также важна информация о термическом УРС исследуемого вещества.

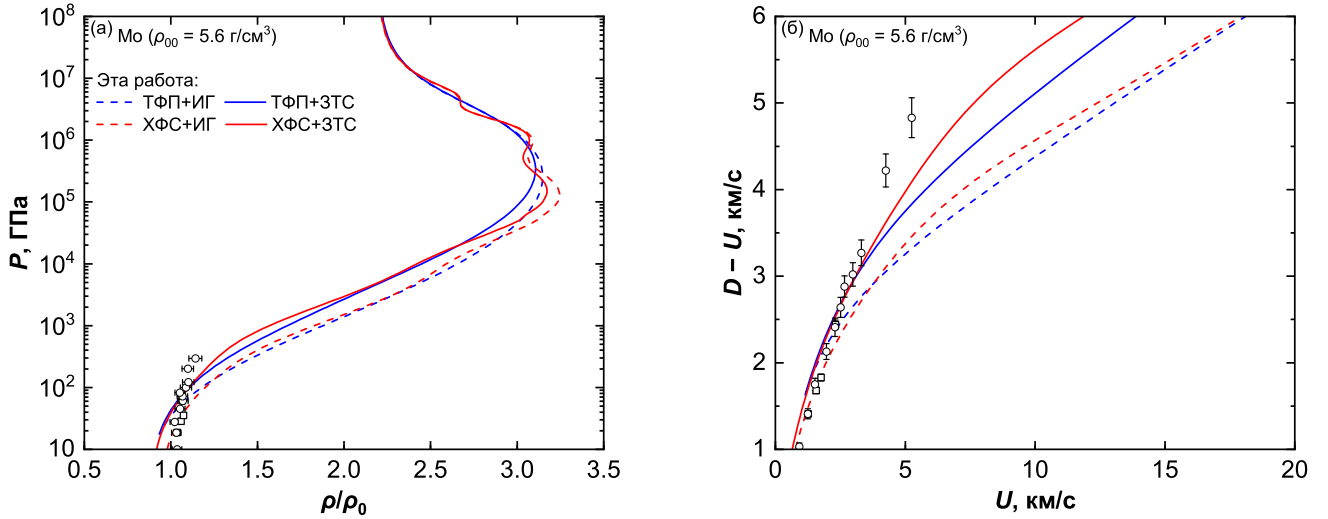


Рисунок 2.14 — Ударные адиабаты пористых образцов молибдена ($m_p = 1.825$, $\rho_{00} = 5.6$ г/см³), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными (M11—[136], M12—[156]).

Ударные адиабаты пористых образцов молибдена ($m_p = 1.825$, $\rho_{00} = 5.6$ г/см³), полученные по различным моделям приведены на рисунке 2.14. Здесь наиболее близкий к экспериментальным данным [136; 156] результат даёт модель ХФС+ЗТС.

Представленные в подразделе 2.2.4 результаты опубликованы в статье [5] и в докладах [25; 27].

2.2.5 Диоксид кремния

Диоксид кремния в модификации кварца является одним из самых распространённых и хорошо изученных минералов земной коры. Кроме того, динамический импеданс кварца ($\rho_{00}D$) близок к аналогичной величине у алюминия в широком диапазоне волновых скоростей, тем самым кварц удобно использовать в качестве стандарта в экспериментах по относительным изменениям ударно-волновых свойств алюминия.

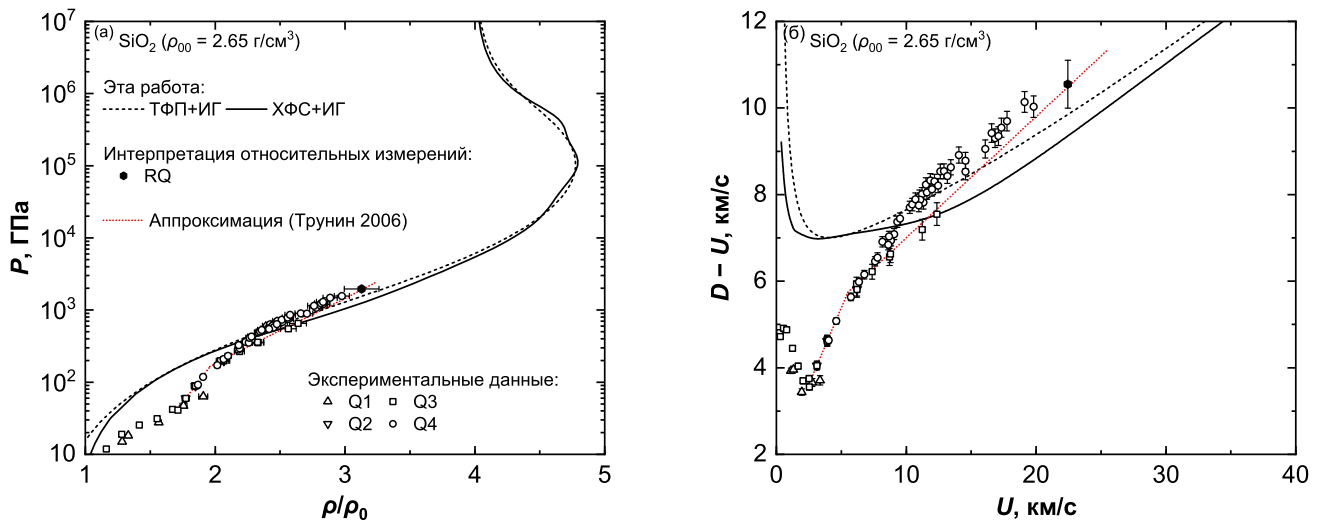


Рисунок 2.15 — Ударные адиабаты сплошных образцов кварца ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 2.65 \text{ г/см}^3$), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по модели ИГ в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными по абсолютным измерениям сжимаемости (Q1—[176], Q2—[177], Q3—[178], Q4—[179]), с интерпретацией данных относительных измерений (RQ—[158]) и с эмпирической аппроксимацией, построенной на основе данных по абсолютным и относительным измерениям сжимаемости кварца и кварцита (Трунин 2006—[143, с. 296—312]).

Ударные адиабаты сплошного образца кварца ($\rho_{00} = \rho_0 = 2.65 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -9.74 \text{ кДж/г}$), рассчитанные по моделям ТФП+ИГ и ХФС+ИГ представлены на рисунке 2.15. Важно отметить, что расчёты по квантово-статистическим моделям были проведены в приближении диссоциированных молекул (химические связи не учитывались), поэтому согласие с экспериментальными данными не ожидается при давлениях $P \lesssim 0.6 \text{ ТПа}$, ниже области полной диссоциации [180]. Тем не менее, выше границы этой области ни одна из представленных моделей не описывает доступные экспериментальные данные по абсолютным измерениям ударной сжимаемости кварца [179], что связано с недостаточной обоснованностью использования приближения идеального газа для учёта ионной подсистемы в этом случае. Кроме того, показано, что по сравнению с простыми веществами для смесей менее выражено проявление

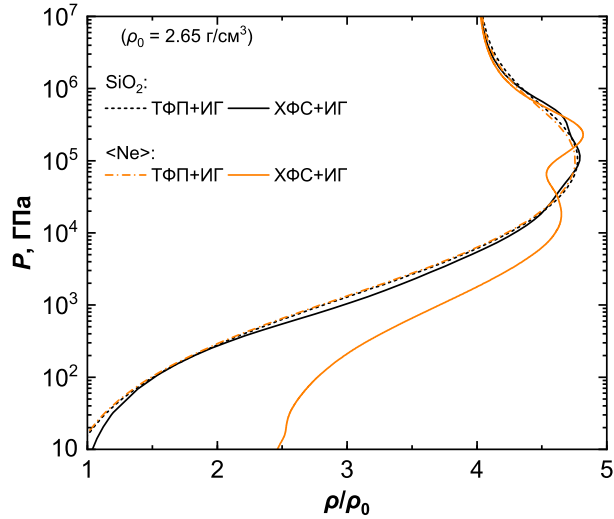


Рисунок 2.16 — Ударные адиабаты кварца и усреднённого элемента $\langle \text{Ne} \rangle$ ($Z_{\langle \text{Ne} \rangle} = 10$, $A_{\langle \text{Ne} \rangle} = 20.028$) рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по модели ИГ. Параметры уравнения Гюгонио P_0 , E_0 , ρ_{00} для SiO_2 и $\langle \text{Ne} \rangle$ выбраны идентично.

оболочечных эффектов, что заключается в близких результатах по квантово-механической модели ХФС и квазиклассической модели ТФП.

Отдельной задачей является сравнение результатов полученных для смеси и отдельного элемента, заряд ядра и атомная масса которого равняются среднему заряду и средней массе рассматриваемой молекулы. В частности, для SiO_2 ($\langle Z_{\text{SiO}_2} \rangle = 10$, $\langle A_{\text{SiO}_2} \rangle = 20.028$), с точность до небольшой разницы в атомной массе, таким элементом является неон ($Z_{\text{Ne}} = 10$, $A_{\text{Ne}} = 20.179$).

На рисунке 2.16 приведены ударные адиабаты кварца и усреднённого элемента $\langle \text{Ne} \rangle$ ($Z_{\langle \text{Ne} \rangle} = 10$, $A_{\langle \text{Ne} \rangle} = 20.028$) рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по модели ИГ. В рамках задачи построения ударных адиабат, расчёты по моделям ТФП для молекулы и усреднённого элемента дают близкие результаты. Это находится в соответствии с тем фактом, что модель ТФП обладает свойством автомодельности по Z и A . Тогда как модель ХФС не является автомодельной, и расчёты по этой модели для молекулы и усреднённого элемента приводят к сильно различающимся результатам. Также показано, что осцилляции расчётной кривой для молекулы имеют более сглаженный вид, по сравнению с осцилляциями, полученными для одного элемента.

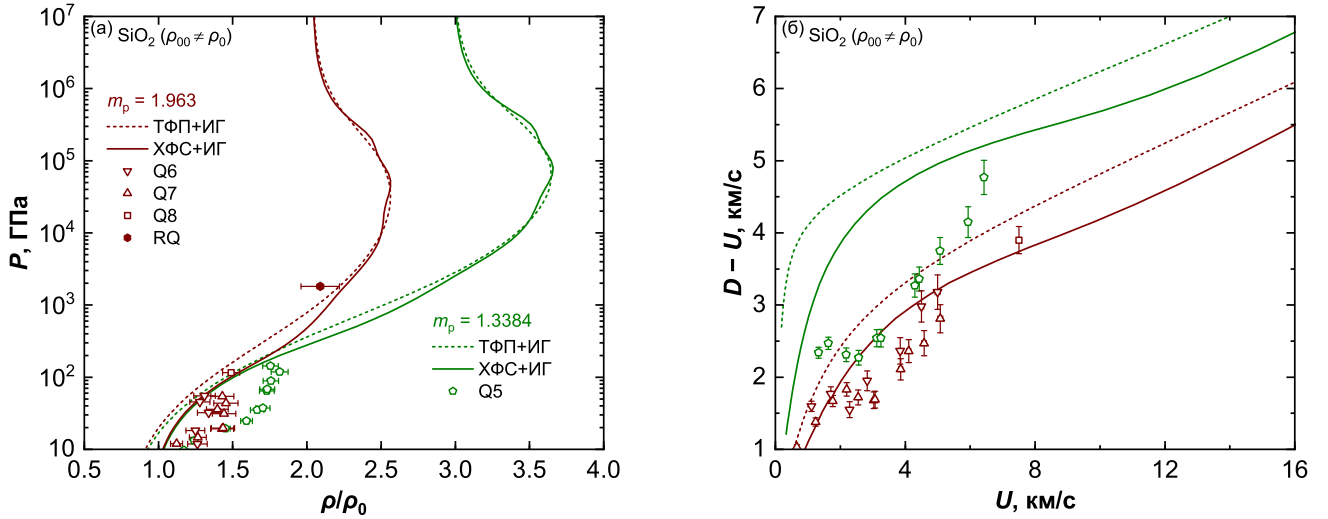


Рисунок 2.17 — Ударные адиабаты образцов кварца с пористостью $m_p = 1.3384$ ($\rho_{00} = 1.98$ г/см³) и $m_p = 1.963$ ($\rho_{00} = 1.35$ г/см³), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по модели ИГ в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U . Приведено сравнение с экспериментальными данными по абсолютным измерениям сжимаемости (Q5—[181, с. 376—378], Q6—[182], Q7—[183], Q8—[158]) и с интерпретацией данных относительных измерений (RQ—[158]).

На рисунке 2.17 приведены результаты расчётов ударных адиабат для пористых образцов кварца. Показано, что с увеличением пористости, результаты расчётов не противоречат данным экспериментов [158; 182], начиная с меньших давлений. Это согласуется с тем фактом, что образец с большей пористостью при ударном сжатии будет разогрет сильнее, чем образец с меньшей пористостью при том же давлении. Тем самым, применение используемых модельных допущений становится более оправданным. Но при этом растёт неточность, связанная с выбором модели учёта ионного вклада.

Помимо расчётов для диоксида кремния в модификации кварца, также были проведены расчёты ударной адиабаты стишовита ($\rho_{00} = 4.29$ г/см³) по моделям ТФП+ИГ и ХФС+ИГ (рисунок 2.18). Значения степени сжатия в зависимости от давления на ударной адиабате стишовита по модели ХФС+ИГ приведены в приложении Б в таблице Б.4.

Представленные в подразделе 2.2.4 результаты опубликованы в докладах [9—11; 13; 15].

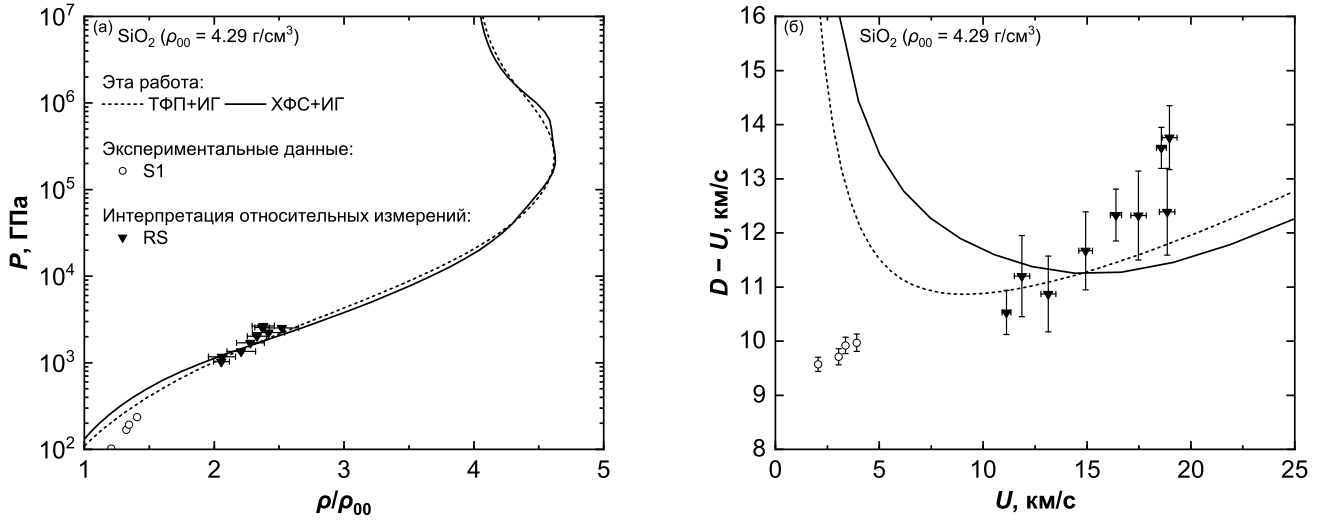


Рисунок 2.18 — Ударные адиабаты сплошных образцов стишовита ($m_p = 1$, $\rho_{00} = 4.29$ г/см³), рассчитанные по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по модели ИГ в координатах (а) P от ρ/ρ_0 и (б) $D - U$ от U .

Приведено сравнение с экспериментальными данными по абсолютным измерениям сжимаемости (S1—[184]) и с интерпретацией данных относительных измерений с кварцевым стандартом (RS—[185]).

2.3 Изоэнтропическая разгрузка ударно-сжатых образцов

Среди данных динамических экспериментов важное значение имеют результаты регистрации кривых изоэнтропической разгрузки (адиабатического расширения) ударно-сжатых образцов, позволяющие получить информацию о термодинамических параметрах веществ в промежуточном диапазоне состояний между конденсированным веществом и газом.

Связь между плотностью ρ_H , давлением P_H и энергией E_H вещества в сжатом состоянии и соответствующими характеристиками вещества в волне расширения описывается с помощью интегралов Римана [127]:

$$\rho^{-1} = \rho_H^{-1} + \int_P^{P_H} \left(\frac{dU}{dP} \right)^2 dP, \quad (2.9)$$

$$E = E_H - \int_P^{P_H} P \left(\frac{dU}{dP} \right)^2 dP. \quad (2.10)$$

Функция $\left(\frac{dU}{dP}\right)^2$ может быть выражена с помощью уравнения (2.9) и соотношений Максвелла [106, с. 74] следующим образом:

$$\left(\frac{dU}{dP}\right)^2 = \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_S = \left[\rho^2 \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T + T \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\rho \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \right]^{-1} \triangleq f_{\text{isentrope}}(T, \rho). \quad (2.11)$$

В настоящей работе, для проведения численных расчётов зависимости давления от массовой скорости вдоль изоэнтропы $P = P(U)$ при известном УРС вещества (т.е. при известных функциях давления $P \triangleq f_P(T, \rho)$ и энергии $E \triangleq f_E(T, \rho)$ во всём рассмотренном диапазоне параметров) от состояния с известной температурой T_H и плотностью ρ_H (и соответственно с известным давлением $P_H = f_P(T_H, \rho_H)$) до состояния с заданным давлением P (где для $\Delta P = P_H - P$ выполняется $|\Delta P| \ll |P_H|$) использовалось представление функции (2.11) в виде квадратичного полинома:

$$\left(\frac{dU}{dP}\right)^2 = \left(\frac{dU}{dP}\right)^2 \Big|_{P=P_H} + c_1 \Delta P + c_2 (\Delta P)^2 \triangleq f_{\text{polynomial}}(c_1, c_2), \quad (2.12)$$

где $\left(\frac{dU}{dP}\right)^2 \Big|_{P=P_H} = f_{\text{isentrope}}(T_H, \rho_H)$. Частные производные $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho$, $\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T$ и $\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\rho$ при $T = T_H$ и $\rho = \rho_H$ вычислялись с использованием разностной формулы (2.2).

Используя (2.9) и (2.12), значение плотности ρ при заданном давлении P на изоэнтропе можно выразить через неизвестные коэффициенты c_1 и c_2 :

$$\rho(c_1, c_2) = \left[\left(\frac{dU}{dP}\right)^2 \Big|_{P=P_H} \Delta P + \frac{1}{2} c_1 (\Delta P)^2 - c_2 P_H P \Delta P + \frac{1}{3} c_2 (P_H^3 - P^3) + \rho_H^{-1} \right]^{-1}. \quad (2.13)$$

Аналогичным образом с помощью (2.10) и (2.12) получается выражение для энергии $E = E(c_1, c_2)$. Затем, численным методом относительно неизвестных T , c_1 и c_2 решается следующая система уравнений:

$$\begin{cases} f_P(T, \rho(c_1, c_2)) = P, \\ f_E(T, \rho(c_1, c_2)) = E(c_1, c_2), \\ f_{\text{isentrope}}(T, \rho(c_1, c_2)) = f_{\text{polynomial}}(c_1, c_2). \end{cases} \quad (2.14)$$

Используя найденные коэффициенты c_1 , c_2 и интегрируя квадратный корень функции (2.12) находится изменение массовой скорости $\Delta U = U - U_H$ и соответствующий вид зависимости $P = P(U)$ на промежутке от P_H до P .

Далее, для определения положения изоэнтропы на следующем малом промежутке значения параметров (T_H, ρ_H, U_H) начального состояния выбираются равным значениям параметров (T, ρ, U) ранее определённого конечного состояния на изоэнтропе. После этого, система (2.14) решается для нового значения P .

Измерения термодинамических параметров, проводимые в экспериментах по изоэнтропическому расширению веществ из состояний с высокой плотностью энергии, основаны на использовании барьеров из материалов с различными динамическими импедансами. Расширение ударно-сжатого образца создает в барьере с меньшим динамическим импедансом ударную волну, которая распространяется с измеряемой скоростью D_{barrier} . Если положение ударной адиабаты материала барьера заранее известно, то можно определить давление P и массовую скорость U вещества барьера, которые будут совпадать с соответствующими параметрами расширяющегося образца в силу условия непрерывности на контактной границе.

На рисунке 2.19 представлен результат расчёта изоэнтропы разгрузки алюминия (S^*) из начального состояния с $P_H = 500.2$ ГПа и $U_H = 10.09$ км/с, что соответствует параметрам начального состояния из работы [186] для эксперимента Z711S. Учитывая погрешность определения давления и массовой скорости в этом эксперименте, можно утверждать, что ударная адиабата сплошных образцов алюминия рассчитанная, по модели ХФС+ЗТС (Н), описывает это состояние, а соответствующая расчётная изоэнтропа разгрузки (S^*) описывает состояние на контактной границе с аэрогелем SiO_2 .

Кроме изоэнтропы разгрузки алюминия, также были построены изоэнтропы разгрузки ударно-сжатых образцов молибдена. При этом параметры P_H, U_H в начальном состоянии для расчётных изоэнтроп S_1^* и S_2^* (рисунок 2.20) были взяты из работ [46] и [47] соответственно. Здесь также наблюдается хорошее согласие положения, как ударных адиабат веществ барьеров, так и расчётных изоэнтроп с экспериментальными данными. Но стоит отметить, что измерения в экспериментах [46; 47] носят относительный характер, и их интерпретация зависит от выбранного УРС для исследуемого вещества. В частности, при тех

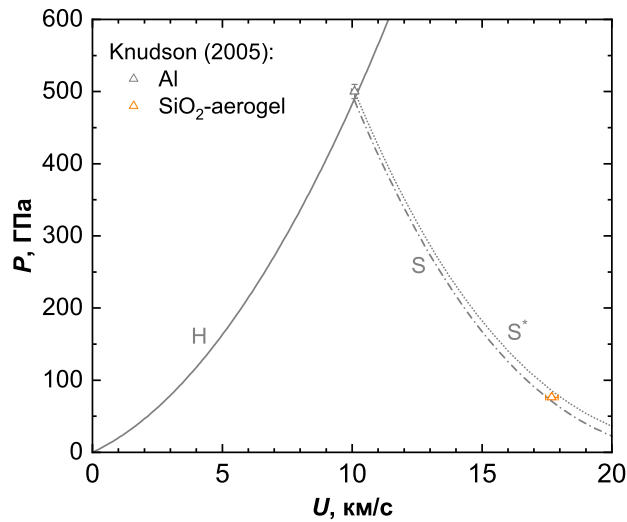


Рисунок 2.19 — Ударная адиабата H (сплошная серая кривая) и изоэнтропа разгрузки S^* (пунктирная серая кривая) алюминия из состояния при $P = 500.2$ ГПа, $U = 10.09$ км/с (серый маркер—[186]), рассчитанные по модели ХФС+ЗТС. Также приведена изоэнтропа разгрузки S (штрих-пунктирная серая кривая), построенная по модели ХФС+ЗТС из лежащей на ударной адиабате H точки при $U^{\text{HFS+CHS}} = 10.09$ км/с. Жёлтым маркером обозначена экспериментальная точка из работы [186] по разгрузке ударно-сжатого алюминия в барьер из аэрогеля SiO_2 .

же значениях волновой скорости D рассчитанные значения P_H , U_H на ударной адиабате молибдена по выбранной в работах [46; 47] модели УРС и по модели ХФС+ЗТС (смотри начальное положение кривых S_1 и S_2 на рисунке 2.20) значительно отличаются. Поэтому, в данном случае более предпочтительней будет провести сравнение результатов расчётов в координатах непосредственно связанными с измеряемыми в этих экспериментах величинами. К примеру, можно выразить волновую скорость образованной в барьере ударной волны D_{barrier} как функцию от начальной волновой скорости в ударно-сжатом образце (в экране) D_{screen} . Для того, чтобы получить теоретическую зависимость $D_{\text{barrier}} = f(D_{\text{screen}})$ для выбранной модели, необходимо построить набор изоэнтроп разгрузки из различных начальных состояний лежащих на ударной адиабате материала экрана и пересечь (в $P-U$ плоскости) эти изоэнтропы с ударной адиабатой материала барьера. При этом все кривые должны быть построены по одной модели.

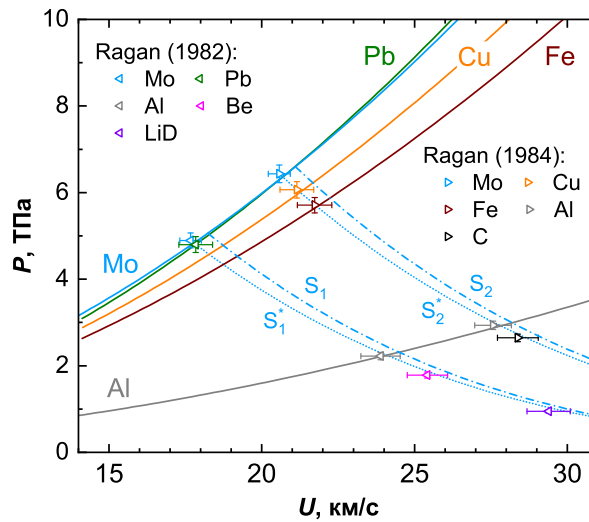


Рисунок 2.20 — Сравнение результатов расчётов ударных адиабат сплошных образцов различных веществ (сплошные кривые) и изоэнтроп разгрузки ударно-сжатых образцов молибдена S_1^* (из состояния при $P = 4.895$ ТПа, $U = 17.67$ км/с) и S_2^* ($P = 6.433$ ТПа, $U = 20.57$ км/с) с экспериментальными данными из работ [46; 47]. Также представлены изоэнтропы разгрузки молибдена S_1 и S_2 , построенные из начальных состояний, соответствующих состояниям на рассчитанной ударной адиабате сплошного образца молибдена при волновых скоростях $D_{\text{Mo}}^{\text{HFS+CHS}} = 27.16$ и 30.6 км/с соответственно.

Расчёты всех кривых выполнены по модели ХФС+ЗТС.

На рисунке 2.21 представлены теоретические зависимости $D_{\text{barrier}} = f(D_{\text{shield}})$ рассчитанные по модели ХФС+ЗТС для экрана из молибдена и барьеров из различных материалов. Показано, что расчёты по модели ХФС+ЗТС хорошо согласуются с экспериментальными данными [46; 47], а характер полученных зависимостей близок к линейному.

Представленные в разделе 2.3 результаты опубликованы в статье [5] и в докладах [21; 25; 27].

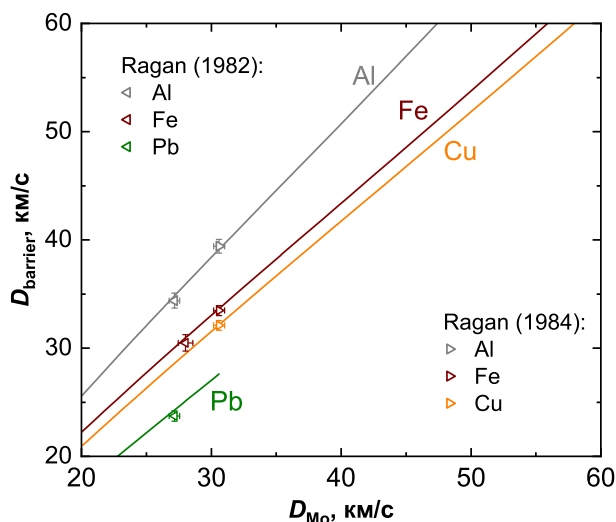


Рисунок 2.21 — Изоэнтропическая разгрузка ударно-сжатых образцов молибдена в барьеры из различных материалов: железо (красная кривая), медь (оранжевая кривая), алюминий (серая кривая) и свинец (тёмно-зелёная кривая). Представлены зависимости волновой скорости в сжатом барьере (D_{barrier}) от начальной волновой скорости в молибдене (D_{Mo}), рассчитанные по модели ХФС+ЗТС. При волновых скоростях в молибдене $D_{\text{Mo}} > 30$ км/с динамический импеданс свинца становится больше динамического импеданса молибдена. Маркерами обозначены измеренные в экспериментах [46; 47] волновые скорости.

2.4 Интерпретация относительных измерений сжимаемости в сильных ударных волнах

Максимальные давления в экспериментах по ударному сжатию были получены и измерены в рамках метода отражения (метод сопоставления динамических импедансов) [158]. В частности, в работе [187] в рамках этого метода было получено давление в ударно-сжатом алюминиевом образце $P \sim 500$ ГПа, что соответствует рекордным зафиксированным скоростям фронта ударной волны в алюминии $D_{\text{Al}} \sim 500$ км/с. В этой и подобных постановках экспериментов ударная волна проходит через экран из материала с известными динамическими характеристиками (ударно-волновой эталон) и затем достигает поверхности исследуемого образца. После этого изоэнтропическая волна разгрузки (в случае,

если динамический импеданс $\rho_0 D$ исследуемого вещества меньше, чем таковой у эталона) или ударная волна повторного сжатия (в противном случае) отражается обратно в экран с тем же давлением, что и за фронтом ударной волны в исследуемом материале. В эксперименте измеряются скорости ударных волн в эталоне (D_{std}) и в исследуемом образце (D_{smp}) [127]. Эта постановка эксперимента аналогично способу измерения параметров изоэнтропической разгрузки, описанный в разделе 2.3, где в качестве барьера выступает образец исследуемого вещества, а в качестве материала экрана используется ударно-волновой эталон.

В настоящей работе, для широкого диапазона волновых скоростей в исследуемых образцах ($10 \leq D_{\text{smp}} \leq 500$ км/с) и для различных пар веществ были получены теоретические зависимости вида $D_{\text{smp}} = f(D_{\text{std}})$. Для этого предварительно были построены ударные адиабаты и соответствующий набор изоэнтроп разгрузки и ударных адиабат повторного сжатия для алюминия, железа, меди, молибдена, свинца и кварца. Расчёты для простых веществ проводились по 4 комбинациям одной из двух моделей электронной подсистемы (ТФП или ХФС) с одной из двух моделей ионной подсистемы (ИГ или ЗТС). Для кварца вклад ионной подсистемы в термодинамику учитывался только в приближении ИГ. Проведено сравнение полученных теоретических зависимостей с результатами относительных измерений сжимаемости алюминия и молибдена (в качестве исследуемых образцов) в сильных ударных волнах, образованных ядерными [46; 47; 57; 172; 178; 187; 188] и химическими [189; 190] взрывами.

Детальное сравнение рассчитанных зависимостей $D_{\text{Fe}}/D_{\text{Al}} = f(D_{\text{Al}})$ с данными из экспериментов по относительным измерениям ударной сжимаемости алюминия представлено на рисунке 2.22. Учитывая разброс положения экспериментальных точек [57; 188—190], можно утверждать, что модели ХФС+ИГ и ХФС+ЗТС обеспечивают наилучшее согласие с экспериментальными данными при $15 \lesssim D_{\text{Al}} \lesssim 100$ км/с среди всех рассмотренных квантово-статистических моделей. Этот факт служит косвенным доказательством наличия существенного влияния оболочечных эффектов на термодинамические свойства горячей

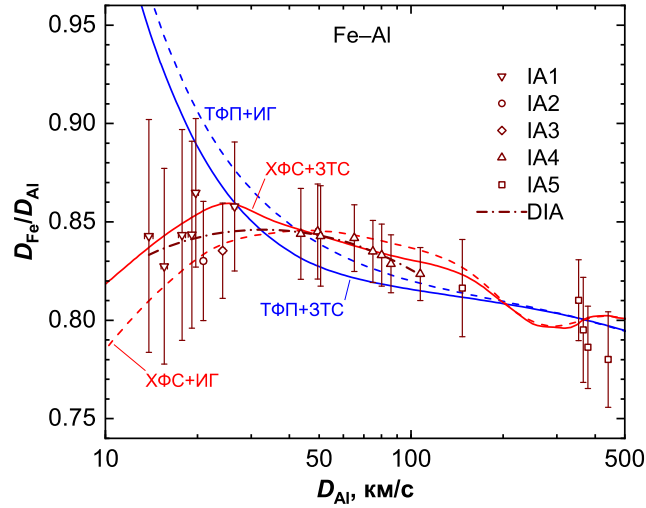


Рисунок 2.22 — Отношение волновой скорости в экране из железа D_{Fe} к волновой скорости образованной в исследуемом образце алюминия ударной волны D_{Al} на их границе контакта. Представлены расчётные зависимости по комбинированным моделям ТФП+ИГ (синяя штриховая кривая), ТФП+ЗТС (синяя сплошная кривая), ХФС+ИГ (красная штриховая кривая) и ХФС+ЗТС (красная сплошная кривая). Также приведена эмпирическая зависимость DIA из работы [188] (тёмно-красная штрих-пунктирная кривая). Маркерами обозначены экспериментальные данные: IA1—[188], IA2—[189], IA3—[190], IA4—[57], IA5—[187].

плотной плазмы, что соответствует выводам работы [57]. Тем не менее, в диапазоне волновых скоростей $100 \lesssim D_{\text{Al}} \lesssim 1000$ км/с, где амплитуда наблюдаемых в расчётах осцилляций максимальна, и квазиклассический (ТФП) и квантовомеханический (ХФС) варианты расчётов не противоречат экспериментальным данным из работы [187].

На рисунке 2.23 представлено отношение волновых скоростей в экране из молибдена и в исследуемом образце алюминия. Результаты расчётов по моделям ТФП и ХФС (независимо от способа учёта ионного вклада) находятся в согласии с доступными экспериментальными данными [46; 47]. Но при этом, для ударных волн меньшей интенсивности, ни одна из представленных моделей не описывает экспериментальные данные из работы [191].

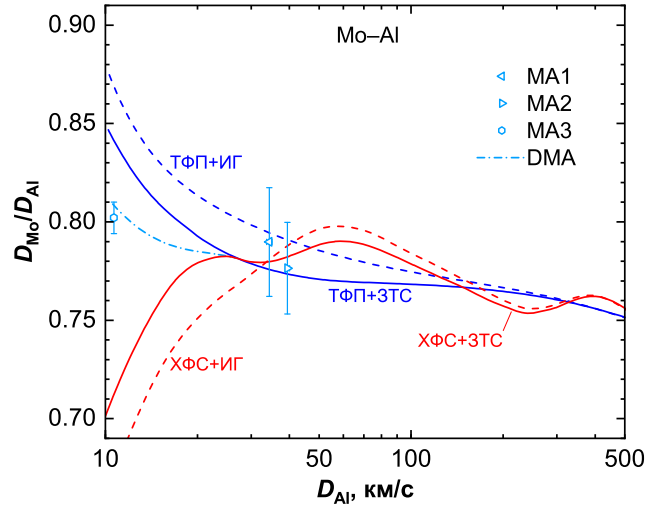


Рисунок 2.23 — Отношение волновой скорости в экране из молибдена D_{Mo} к волновой скорости образованной в исследуемом образце алюминия ударной волны D_{Al} на их границе контакта. Представлены расчётные зависимости по комбинированным моделям ТФП+ИГ (синяя штриховая кривая), ТФП+ЗТС (синяя сплошная кривая), XФС+ИГ (красные штриховая кривая) и XФС+ЗТС (красная сплошная кривая). Также приведена полуэмпирическая зависимость DMA (уравнение (2.15), голубая штрих-пунктирная кривая), построенная на основе комбинированной модели XФС+ЗТС. Маркерами обозначены экспериментальные данные: MA1—[46], MA2—[47], MA3—[191].

Для оценки степени отклонения расчётных зависимостей от экспериментальных данных была построена полуэмпирическая зависимость $D_{Al} = f(D_{Mo})$ в следующей форме:

$$D_{Al} = B_0 + B_1 D_{Mo} + B_2 D_{Mo}^2 + B_3 D_{Mo}^3, \quad (2.15)$$

для значений волновых скоростей в молибдене $8.55 \leq D_{Mo} \leq 20.915$ км/с с коэффициентами $B_0 = -2.0381$ км/с, $B_1 = 1.6098$, $B_2 = -0.019105$ с/км, $B_3 = 0.00038105$ с²/км². Эта зависимость была получена с помощью замены начального участка ($0 \leq U \leq U^*$) ударных адиабат алюминия и молибдена, рассчитанных по модели XФС+ЗТС, аппроксимациями (2.5) и (2.8) соответственно. Кроме того, в этом случае предполагалось, что в координатах $P-U$ положение изоэнтропы разгрузки достаточно точно совпадает с положением

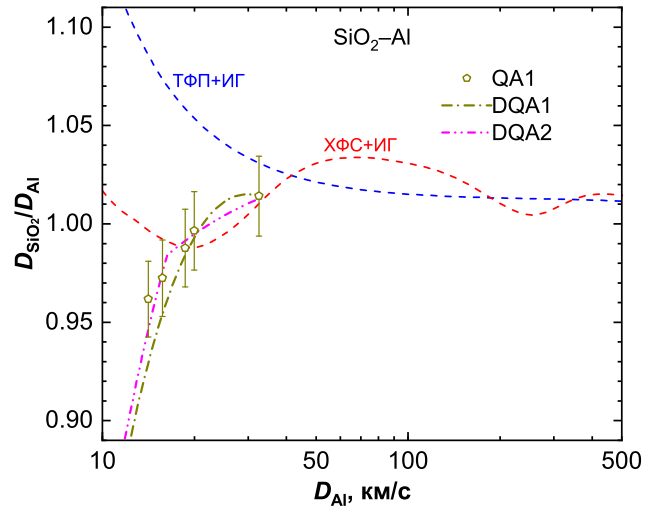


Рисунок 2.24 — Отношение волновой скорости в экране из кварца D_{SiO_2} к волновой скорости образованной в исследуемом образце алюминия ударной волны D_{Al} на их границе контакта. Представлены расчётные зависимости по комбинированным моделям ТФП+ИГ (синяя штриховая кривая) и ХФС+ИГ (красная штриховая кривая). Также приведены эмпирические зависимости DQA1—[178] (тёмно-жёлтая штрих-пунктирная кривая) и DQA2—[158] (пурпурная штрихпунктирная кривая с двумя точками). Маркерами обозначены экспериментальные данные: QA1—[178].

зеркального отражения соответствующей ударной адиабаты [192]. В случае молибдена, дополнительные расчёты ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки по моделям ТФП+ИГ, ТФП+ЗТС, ХФС+ИГ и ХФС+ЗТС показали, что для этих моделей это предположение оправдано при $D_{\text{Mo}} \lesssim 20$ км/с. Итого, полученная с помощью аппроксимации данных по абсолютным измерениям сжимаемости зависимость (2.15) описывает данные относительных измерений [191] и плавно переходит в расчётную зависимость по модели ХФС+ЗТС.

В случае когда динамический импеданс исследуемого образца примерно равен динамическому импедансу эталона, замена изоэнтропы разгрузки зеркальным отражением ударной адиабаты для получения связи между ударно-волновыми характеристикам в этих вещества оправдана в более широкой области параметров. В частности, эта замена оправдана при рассмотрении па-

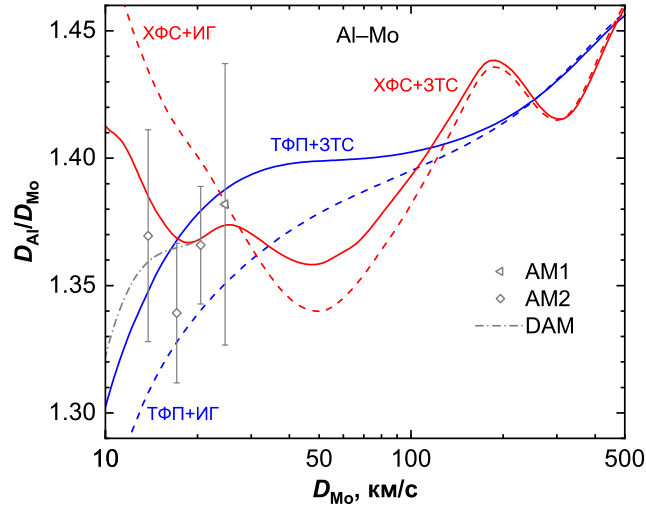


Рисунок 2.25 — Отношение волновой скорости в экране из алюминия D_{Al} к волновой скорости образованной в исследуемом образце молибдена ударной волны D_{Mo} на их границе контакта. Представлены расчётные зависимости по комбинированным моделям ТФП+ИГ (синяя штриховая кривая), ТФП+ЗТС (синяя сплошная кривая), ХФС+ИГ (красная штриховая кривая) и ХФС+ЗТС (красная сплошная кривая). Также приведена полуэмпирическая зависимость DAM (уравнение (2.16), серая штрих-пунктирная кривая), построенная на основе комбинированной модели ХФС+ЗТС. Маркерами обозначены экспериментальные данные: AM1—[46], AM2—[172].

ры кварц–алюминий (рисунок 2.24) во всём рассмотренном диапазоне волновых скоростей.

Результаты расчётов зависимостей волновых скоростей для обратного расположения образцов молибдена (исследуемое вещество) и алюминия (эталон) представлены на рисунке 2.25. В этом случае также и квазиклассический (ТФП), и квантово-механический (ХФС) расчёты с использованием модели ЗТС для описания ионного вклада не противоречат доступным экспериментальным данным [46; 172]. В то же время, способ учёта термодинамики ионов по модели ЗТС показал более широкую область согласия с экспериментами по сравнению с применением модели ИГ. Для оценки отношения волновых скоростей в молибдене и алюминии в области параметров, где приближения квантово-статистических моделей среднего атома неприменимы, можно использовать

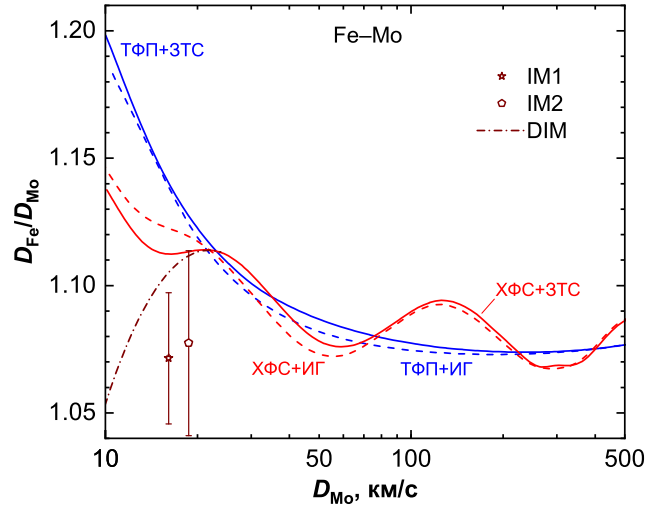


Рисунок 2.26 — Отношение волновой скорости в экране из железа D_{Fe} к волновой скорости образованной в исследуемом образце молибдена ударной волны D_{Mo} на их границе контакта. Представлены расчётные зависимости по комбинированным моделям ТФП+ИГ (синяя штриховая кривая), ТФП+ЗТС (синяя сплошная кривая), ХФС+ИГ (красная штриховая кривая) и ХФС+ЗТС (красная сплошная кривая). Также приведена полуэмпирическая зависимость DIM (уравнение (2.17), тёмно-красная штрих-пунктирная кривая), построенная на основе комбинированной модели ХФС+ЗТС. Маркерами обозначены экспериментальные данные: IM1—[193], IM2—[190].

следующую аппроксимацию (полученную по процедуре аналогичной способу построения зависимости (2.15)):

$$D_{\text{Mo}} = C_0 + C_1 D_{\text{Al}} + C_2 D_{\text{Al}}^2 + C_3 D_{\text{Al}}^3, \quad (2.16)$$

где $C_0 = 3.1125$ км/с, $C_1 = 0.34766$, $C_2 = 0.016155$ с/км, $C_3 = -2.3016 \times 10^{-4}$ с²/км² и $13 \leq D_{\text{Al}} \leq 28.06$ км/с. Как видно из рисунка 2.25, полученная зависимость (2.16) также не противоречит экспериментальным данным [172] по относительным измерениям сжимаемости.

Хотя для пар веществ Fe–Al, Mo–Al и Al–Mo удалось получить согласие результатов модели ХФС+ЗТС или построенных на её основе полуэмпирических аппроксимаций со всеми доступными экспериментальными данными по относительным измерениям ударной сжимаемости, для некоторых других пар веществ этого не удалось. В частности, для пары Fe–Mo (рисунок 2.26) все

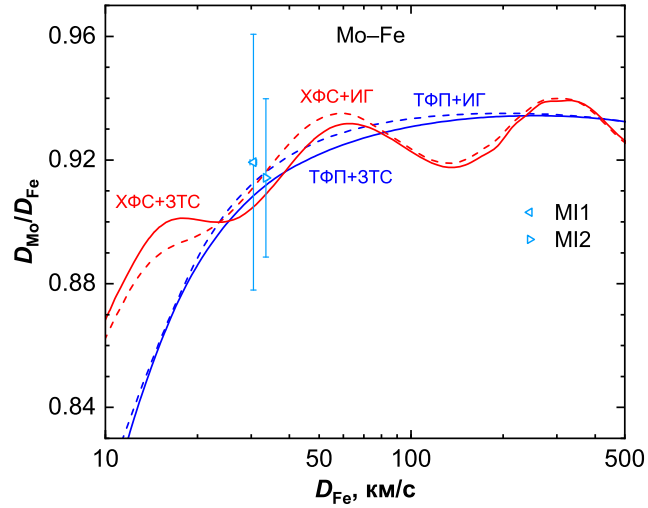


Рисунок 2.27 — Отношение волновой скорости в экране из молибдена D_{Mo} к волновой скорости образованной в исследуемом образце железа ударной волны D_{Fe} на их границе контакта. Представлены расчётные зависимости по комбинированным моделям ТФП+ИГ (синяя штриховая кривая), ТФП+ЗТС (синяя сплошная кривая), ХФС+ИГ (красная штриховая кривая) и ХФС+ЗТС (красная сплошная кривая). Маркерами обозначены экспериментальные данные: MI1—[46], MI2—[47].

рассмотренные квантово-статистические модели не согласуются с экспериментальными данными из работы [193]. Полученная на основе модели ХФС+ЗТС аппроксимация

$$D_{\text{Mo}} = E_0 + E_1 D_{\text{Fe}} + E_2 D_{\text{Fe}}^2 + E_3 D_{\text{Fe}}^3 \quad (2.17)$$

($E_0 = 1.5678$ км/с, $E_1 = 0.781$, $E_2 = 0.0016191$ с/км, $E_3 = 2.189 \times 10^{-5}$ с²/км², $9 \leq D_{\text{Fe}} \leq 26.38$ км/с) также не описывает эти данные. Хотя, образец молибдена, использовавшийся в этом эксперименте, имел небольшую начальную пористость ($m = 1.015$), дополнительные расчеты показали, что данное значение степени пористости не влияет на положение экспериментальной точки [193] в $D_{\text{smp}}-D_{\text{std}}$ плоскости. В то же время, при обратном порядке расположения образцов молибдена и железа, результаты полученные по каждой из рассмотренных квантово-статистических моделей описывают все доступные экспериментальные данные [46; 47] (рисунок 2.27).

Общим для всех полученных по модели ХФС зависимостей вида $D_{\text{смп}} = f(D_{\text{std}})$ является наличие осциляционного поведения при достаточно больших волновых скоростях (смотри положение кривых по модели ХФС относительно кривых по модели ТФП на рисунках 2.22–2.27). Полученные теоретические зависимости позволяют локализовать область параметров, где проявление оболочечных эффектов максимально, и тем самым, при достаточной экспериментальной точности измерения волновых скоростей ($\Delta D/D \lesssim 0.5\%$), это позволит лучшим образом экспериментально исследовать влияние оболочечных эффектов [194] на термодинамические свойства веществ.

Помимо исследования ударного сжатия сплошных образцов, относительными методами также исследовалось ударная сжимаемость образцов с различными степенями пористости. При этом, подбирая в экспериментах пористость исследуемого образца с относительно высокой начальной динамической жёсткостью, можно добиться примерного совпадения этой характеристики с известной характеристикой эталонного материала с меньшей динамической жёсткостью, и тем самым оправдать использование метода зеркального отражения ударной адиабаты эталона для определения ударно-волновых параметров в исследуемом образце в широком диапазоне параметров (что, к примеру, справедливо для сплошного образца алюминия и образца меди со степенью пористости $m_p = 3.1$). Результаты расчетов ударной сжимаемости меди для образцов с различными начальными плотностями при использовании алюминиевого эталона в рамках метода сопоставления динамических импедансов приведены на рисунке 2.28. Видно, что полученные теоретические зависимости хорошо согласуются с экспериментальными данными по сжатию сплошного образца меди с использованием алюминиевого стандарта [172]. С другой стороны, рассмотренные модели среднего атома дают лишь качественное описание результатов экспериментов [195; 196] с пористыми образцами меди, несмотря на то, что пористые образцы при ударном сжатии подвергаются значительно большему разогреву по сравнению со сплошными образцами, и, тем самым,

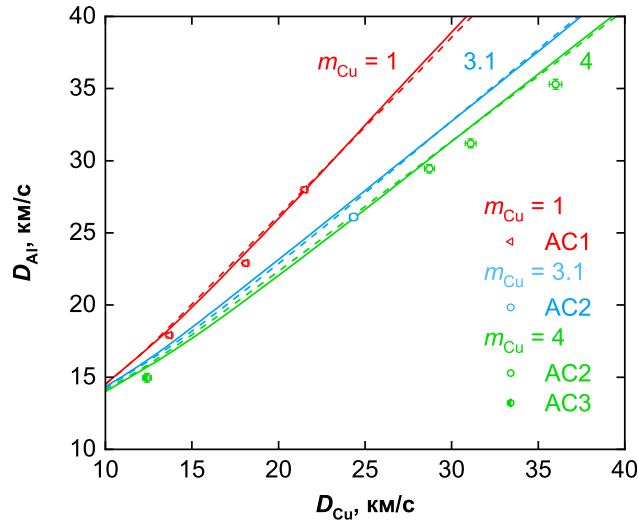


Рисунок 2.28 — Рассчитанное соотношение волновых скоростей в экране из алюминия ($\rho_{00} = 2.712 \text{ г/см}^3$) и медных образцах с плотностями $\rho_{00} = 8.93$ ($m_p = 1$), 2.88 ($m_p = 3.1$) и 2.23 г/см^3 ($m_p = 4$). Все расчёты выполнены по модели ХФС для электронной подсистемы с учётом ионной подсистемы по моделям ИГ (штриховые кривые) и ЗТС (сплошные кривые). Маркерами обозначены экспериментальные данные по относительным измерениям ударной сжимаемости для пары Al–Cu: AC1—[172], AC2—[195] и AC3—[196].

использование аппроксимаций квантово-статистического подхода более оправдано в данном случае.

Кроме того, проведено теоретическое исследование ударной сжимаемости меди при использовании эталона с большей динамической жёсткостью, а именно со свинцом (значения степени сжатия в зависимости от давления на ударной адиабате свинца по модели ХФС+ЗТС приведены в таблице А.9 приложения А). Результаты квантово-статистических расчётов приведены на рисунке 2.29. В этом случае хорошее согласие с экспериментальными данными [197; 198] показали расчёты по модели ХФС независимо от способа учёта ионного вклада.

Для определения массовой скорости U и других ударно-волновых параметров (давления P и степени сжатия ρ/ρ_{00}) в исследуемом веществе, необходимо знание УРС вещества экрана (эталона). В настоящей работе, используя модель ХФС+ЗТС для определения УРС железа и молибдена, была проведена интерпретация экспериментов [46; 47; 57; 187–190] по относительным измерениям

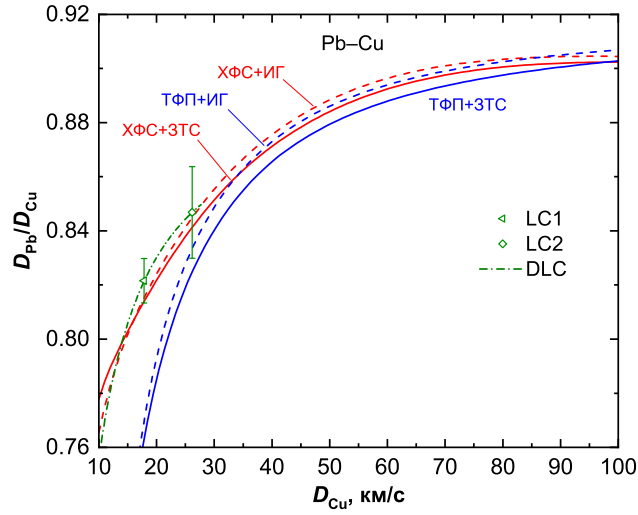


Рисунок 2.29 — Отношение волновой скорости в экране из свинца D_{Pb} к волновой скорости образованной в исследуемом образце меди ударной волны D_{Cu} на их границе контакта. Представлены расчётные зависимости по комбинированным моделям ТФП+ИГ (синяя штриховая кривая), ТФП+ЗТС (синяя сплошная кривая), ХФС+ИГ (красная штриховая кривая) и ХФС+ЗТС (красная сплошная кривая). Маркерами обозначены экспериментальные данные: LC1—[197], LC2—[198]. Также приведена эмпирическая зависимость $D_{Pb} = -1.529 + 0.911D_{Cu} - 2.2 \times 10^{-4}D_{Cu}^2$, $7 < D_{Cu} < 27.7$ км/с (DLC—[158], тёмно-зелёная штрих-пунктирная кривая).

ударной сжимаемости алюминия. Полученные с помощью этой интерпретации значения массовой скорости в алюминии U_{Al}^{revis} приведены в приложении В в таблицах В.1 и В.2, где также приведены значения массовых скоростей $U_{Al}^{of\ ref}$ полученных при оригинальных [46; 47; 57; 187–189] и прочих [199] интерпретациях экспериментов наряду с рассчитанной по модели ХФС+ЗТС массовой скоростью в алюминии (U_{Al}^{theor}) для заданного значения волновой скорости D_{Al} .

Сравнение полученных значений давления P_{Al}^{revis} и степеней сжатия $\rho_{Al}^{revis}/\rho_{00}$ с теоретическими ударными адиабатами по моделям ХФС+ЗТС (смотри таблицу А.1 в приложении А) и PIMC+DFT-MD [142] также приведено на рисунке 2.30. Интерпретированные с помощью модели ХФС+ЗТС данные экспериментов по относительной сжимаемости алюминия хорошо согласуются, как

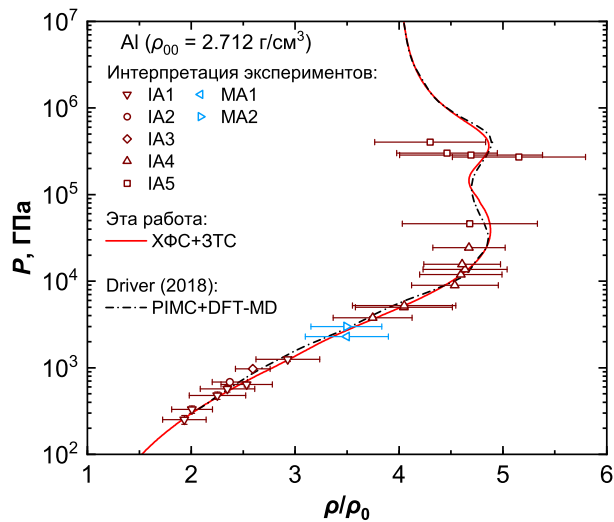


Рисунок 2.30 — Ударные адиабаты сплошных образцов алюминия в координатах P – ρ/ρ_0 , рассчитанные по моделям XFC+3TC (сплошная красная кривая) и PIMC+DFT-MD [142] (чёрная штрих-пунктирная кривая) в сравнении с новой интерпретацией данных относительных измерений [46; 47; 57; 187–190] (смотри значения в таблицах В.1 и В.2). УРС эталонных веществ (железа и молибдена) рассчитаны по модели XFC+3TC. Источники экспериментальных данных обозначены также, как в подписях к рисунками 2.22 и 2.23.

с расчётом абсолютной сжимаемости, проведённым по той же модели, так и с результатом первопринципного расчёта [142].

Представленные в разделе 2.4 результаты опубликованы в статьях [4–6] и в докладах [22–25].

Заключение

В настоящей работе были получены следующие основные результаты:

1. По моделям ТФ, ТФП и ХФС в широком диапазоне температур ($0.1 \leq T \leq 10^5$ эВ) получены значения изохорической и изобарической теплоёмкостей электронной подсистемы алюминия (при плотности $\rho = 2.712$ г/см³) и молибдена (при $\rho = 10.22$ г/см³).
2. По моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада в уравнение состояния по моделям ИГ и ЗТС получены ударные адиабаты сплошных (для давлений $P \geq 100$ ГПа) и пористых ($P \geq 10$ ГПа) образцов алюминия, железа, меди и молибдена для давлений вплоть до 10^8 ГПа. Кроме того, по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада только по модели ИГ получены ударные адиабаты сплошных и пористых образцов кварца (для диапазона давлений $10 \leq P \leq 10^7$ ГПа) и сплошных образцов стишовита ($100 \leq P \leq 10^7$ ГПа).
3. На основе комбинации модели ХФС с моделью ЗТС и экспериментальных данных других авторов по абсолютным измерениям ударной сжимаемости получены аппроксимации ударных адиабат алюминия, железа, меди и молибдена, эффективно учитывающие оболочечные эффекты и рекомендуемые к использованию в качестве ударно-волновых эталонов.
4. По модели ХФС с учётом ионов по модели ЗТС получены изоэнтропы разгрузки алюминия (из ударно-сжатого состояния с давлением $P = 0.5$ ТПа) и молибдена ($P = 4.895$ и 6.433 ТПа), согласующиеся с имеющимися экспериментальными данными.
5. С помощью моделей ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям ИГ и ЗТС получены теоретические зависимости относительного изменения скорости фронта сильных ударных волн при прохождении границы раздела следующих пар веществ: Fe–Al, Mo–Al, SiO₂–Al (только с мо-

делью ИГ), Al–Mo, Fe–Mo и Pb–Cu. Показан осцилляционный характер полученных по модели ХФС зависимостей.

6. На основе модели ХФС с учётом ионной части по модели ЗТС дана интерпретация экспериментальных данных других авторов по относительным измерениям сжимаемости алюминия в сильных ударных волнах (с волновой скоростью $D \geq 10$ км/с) с использованием железного и молибденового эталонов.

Отдельно стоит отметить, что описанная и реализованная в настоящей работе версия модели ХФС с учётом ионного вклада по модели ЗТС показала хорошее согласие с доступными экспериментальными данными по термодинамическим свойствам различных веществ, находящихся в состояниях с высокой плотностью энергии. Рекомендуется дальнейшее исследование возможности применения этой модели для расчёта термодинамических свойств других веществ, не рассмотренных в рамках настоящей работы, а также проведение исследований, нацеленных на более точное определение и дальнейшее расширение области применимости этой модели.

В заключение автор выражает благодарность и большую признательность своему научному руководителю Хищенко К. В. за руководство и содействие на всех этапах работы.

Приложение А

Ударные адиабаты металлов, рассчитанные по модели Хартри–Фока–Слэтера с учётом ионного вклада по модели заряженных твердых сфер

В таблицах А.1–А.9 приведены значения степени сжатия ρ/ρ_{00} вещества в зависимости от давления $P = 10^{n+d}$ (в ГПа) на ударных адиабатах алюминия, железа, меди, молибдена и свинца при заданных начальных параметрах ρ_{00} , P_0 и E_0 в соотношении Гюгонио (2.3). Расчёты проведены по модели ХФС с учётом ионного вклада в рамках модели ЗТС. Приведённые в таблицах А.1–А.8 результаты расчётов обсуждаются в разделе 2.2.

Таблица А.1 — Алюминий ($\rho_{00} = 2.712 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -12.1 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	1.524	1.608	1.701	1.803	1.915	2.036	2.167	2.308	2.458	2.617
3	2.782	2.945	3.102	3.261	3.436	3.627	3.825	4.018	4.200	4.364
4	4.507	4.626	4.722	4.794	4.844	4.873	4.880	4.867	4.834	4.784
5	4.732	4.683	4.677	4.725	4.797	4.853	4.861	4.804	4.695	4.570
6	4.457	4.363	4.287	4.228	4.181	4.144	4.115	4.092	4.073	4.058

Таблица А.2 — Алюминий ($\rho_{00} = 0.904 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -12.1 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	3.369	3.481	3.584	3.670	3.731	3.764	3.785	3.828	3.920	4.060
3	4.234	4.422	4.612	4.793	4.960	5.109	5.238	5.343	5.422	5.525
4	5.548	5.540	5.499	5.422	5.311	5.174	5.041	4.975	5.006	5.085
5	5.145	5.126	5.019	4.847	4.673	4.528	4.414	4.325	4.256	4.202
6	4.160	4.127	4.101	4.080	4.063	4.050	4.040	4.032	4.025	4.020

Таблица А.3 — Железо ($\rho_{00} = 7.85 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -7.452 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	1.312	1.364	1.420	1.482	1.550	1.622	1.699	1.780	1.865	1.953
3	2.044	2.137	2.234	2.336	2.444	2.563	2.693	2.838	2.996	3.163
4	3.334	3.506	3.673	3.829	3.970	4.091	4.192	4.272	4.336	4.392
5	4.451	4.529	4.630	4.748	4.870	4.974	5.071	5.111	5.101	5.085
6	5.036	4.936	4.829	4.764	4.764	4.782	4.758	4.670	4.551	4.440
7	4.348	4.275	4.217	4.172	4.136	4.108	4.086	4.069	4.055	4.044

Таблица А.4 — Железо ($\rho_{00} = 4.3 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -7.452 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	2.010	2.067	2.129	2.194	2.263	2.336	2.414	2.494	2.577	2.668
3	2.768	2.882	3.012	3.159	3.322	3.496	3.677	3.859	4.036	4.201
4	4.349	4.476	4.578	4.655	4.702	4.735	4.753	4.772	4.810	4.881
5	4.984	5.105	5.224	5.322	5.388	5.409	5.380	5.296	5.167	5.013
6	4.893	4.869	4.890	4.873	4.776	4.636	4.504	4.396	4.311	4.245
7	4.194	4.153	4.122	4.097	4.077	4.061	4.049	4.039	4.031	4.024

Таблица А.5 — Медь ($\rho_{00} = 8.93 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -5.324 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	1.398	1.455	1.516	1.581	1.650	1.722	1.798	1.877	1.959	2.047
3	2.139	2.236	2.337	2.444	2.555	2.673	2.798	2.932	3.076	3.230
4	3.391	3.558	3.727	3.891	4.047	4.187	4.309	4.410	4.489	4.548
5	4.590	4.619	4.643	4.688	4.763	4.861	4.967	5.063	5.135	5.173
6	5.167	5.114	5.019	4.898	4.796	4.761	4.773	4.763	4.689	4.573
7	4.457	4.362	4.285	4.226	4.179	4.142	4.112	4.089	4.071	4.057

Таблица А.6 — Медь ($\rho_{00} = 2.2325 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -5.324 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	3.562	3.572	3.602	3.652	3.720	3.803	3.897	3.996	4.096	4.196
3	4.295	4.399	4.510	4.631	4.763	4.901	5.041	5.178	5.304	5.367
4	5.467	5.569	5.607	5.617	5.597	5.554	5.502	5.467	5.462	5.504
5	5.596	5.685	5.748	5.765	5.719	5.599	5.407	5.182	5.025	5.002
6	5.020	4.959	4.803	4.634	4.495	4.386	4.303	4.238	4.188	4.148
7	4.117	4.093	4.074	4.059	4.047	4.037	4.029	4.023	4.019	4.015

Таблица А.7 — Молибден ($\rho_{00} = 10.22 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -6.856 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	1.374	1.430	1.491	1.557	1.627	1.700	1.777	1.858	1.940	2.025
3	2.117	2.217	2.329	2.453	2.588	2.732	2.883	3.037	3.192	3.344
4	3.490	3.632	3.771	3.913	4.065	4.227	4.397	4.571	4.743	4.905
5	5.054	5.183	5.289	5.366	5.412	5.388	5.371	5.337	5.299	5.279
6	5.299	5.335	5.369	5.382	5.347	5.250	5.096	4.924	4.811	4.788
7	4.770	4.683	4.557	4.440	4.346	4.272	4.214	4.169	4.134	4.106

Таблица А.8 — Молибден ($\rho_{00} = 5.6 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -6.856 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	2.016	2.072	2.130	2.192	2.257	2.327	2.405	2.495	2.601	2.725
3	2.865	3.018	3.183	3.354	3.528	3.699	3.861	4.016	4.157	4.288
4	4.417	4.554	4.702	4.861	5.027	5.193	5.351	5.496	5.573	5.674
5	5.746	5.780	5.790	5.766	5.712	5.638	5.569	5.538	5.552	5.586
6	5.605	5.578	5.480	5.304	5.087	4.920	4.876	4.865	4.779	4.634
7	4.499	4.390	4.306	4.240	4.189	4.150	4.118	4.094	4.075	4.059

Таблица А.9 — Свинец ($\rho_{00} = 11.34 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -0.95 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	1.610	1.702	1.802	1.912	2.030	2.157	2.293	2.437	2.589	2.748
3	2.913	3.081	3.250	3.417	3.580	3.739	3.895	4.052	4.211	4.376
4	4.544	4.712	4.875	5.030	5.173	5.304	5.424	5.530	5.635	5.738
5	5.836	5.938	6.016	6.079	6.118	6.130	6.115	6.074	6.039	6.019
6	6.022	6.043	6.066	6.068	6.029	5.936	5.797	5.667	5.603	5.566
7	5.470	5.268	5.016	4.821	4.755	4.709	4.592	4.467	4.365	4.286

Приложение Б

Ударные адиабаты диоксида кремния в формах кварца и стишовита, рассчитанные по модели Хартри–Фока–Слэтера с учётом ионного вклада по модели идеального газа

В таблицах Б.1–Б.4 приведены значения степени сжатия ρ/ρ_{00} образцов кварца (с начальными плотностями $\rho_{00} = 1.35, 1.98$ и 2.65 г/см³) и стишовита ($\rho_{00} = 4.29$ г/см³) в зависимости от давления $P = 10^{n+d}$ (в ГПа) на ударной адиабате, рассчитанной по модели ХФС с учётом ионного вклада по модели ИГ. Приведенные в таблице результаты обсуждаются в подразделе 2.2.5.

Таблица Б.1 — Кварц ($\rho_{00} = 1.35$ г/см³, $P_0 = 0.1$ МПа, $E_0 = -9.74$ кДж/г).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	2.914	3.079	3.250	3.418	3.575	3.715	3.838	3.946	4.042	4.130
3	4.213	4.294	4.376	4.462	4.549	4.634	4.713	4.782	4.839	4.882
4	4.912	4.929	4.939	4.950	4.971	4.999	5.026	5.034	5.014	4.964
5	4.901	4.855	4.826	4.782	4.699	4.584	4.469	4.371	4.292	4.230
6	4.181	4.143	4.113	4.090	4.071	4.056	4.045	4.036	4.028	4.023

Таблица Б.2 — Кварц ($\rho_{00} = 1.98$ г/см³, $P_0 = 0.1$ МПа, $E_0 = -9.74$ кДж/г).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	2.017	2.139	2.277	2.430	2.597	2.774	2.950	3.119	3.276	3.419
3	3.551	3.673	3.788	3.898	4.009	4.120	4.230	4.336	4.433	4.520
4	4.592	4.651	4.695	4.728	4.756	4.785	4.820	4.858	4.888	4.897
5	4.880	4.840	4.797	4.767	4.743	4.700	4.620	4.517	4.416	4.330
6	4.260	4.205	4.162	4.128	4.101	4.080	4.063	4.050	4.040	4.032

Таблица Б.3 — Кварц ($\rho_{00} = 2.65 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -9.74 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	1.512	1.603	1.705	1.820	1.952	2.098	2.259	2.433	2.615	2.796
3	2.970	3.134	3.288	3.433	3.571	3.703	3.832	3.958	4.078	4.190
4	4.291	4.378	4.453	4.513	4.561	4.602	4.641	4.684	4.729	4.768
5	4.791	4.791	4.768	4.736	4.711	4.694	4.666	4.607	4.521	4.426
6	4.341	4.270	4.214	4.169	4.134	4.106	4.084	4.067	4.053	4.042

Таблица Б.4 — Стишовит ($\rho_{00} = 4.29 \text{ г/см}^3$, $P_0 = 0.1 \text{ МПа}$, $E_0 = -9.74 \text{ кДж/г}$).

	$d = 0.0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 2$	0.934	0.988	1.048	1.116	1.191	1.277	1.374	1.483	1.607	1.748
3	1.908	2.087	2.279	2.477	2.671	2.858	3.036	3.206	3.369	3.523
4	3.669	3.805	3.929	4.040	4.137	4.220	4.293	4.350	4.407	4.464
5	4.521	4.571	4.608	4.627	4.626	4.615	4.605	4.598	4.583	4.545
6	4.481	4.402	4.326	4.261	4.207	4.165	4.130	4.104	4.082	4.065

Приложение В

Интерпретация данных относительных измерений ударной сжимаемости сплошных образцов алюминия в сильных ударных волнах

В таблицах В.1 и В.2 приведены экспериментально измеренные значения волновых скоростей D в экранах из молибдена и железа и соответствующая измеренная волновая скорость в алюминиевом образце. Для каждого в отдельности из этих значений волновых скоростей приведены рассчитанные по комбинации моделей ХФС и ЗТС значения массовых скоростей U^{theor} . Также для каждой пары измеренных волновых скоростей приведено значение массовой скорости алюминия, вычисленное в рамках метода сопоставления импедансов в оригинальной работе ($U_{\text{Al}}^{\text{of ref}}$) и в настоящей работе (U^{revis}), в которой для расчёта УРС молибдена и железа использовалась комбинация моделей ХФС и ЗТС.

Таблица В.1 — Ударно-волновые параметры в молибденовом эталоне и в исследуемом образце алюминия.

Источ- ник	D_{Mo} (км/с)	$U_{\text{Mo}}^{\text{theor}}$ (км/с)	D_{Al} (км/с)	$U_{\text{Al}}^{\text{theor}}$ (км/с)	$U_{\text{Al}}^{\text{of ref}}$ (км/с)	$U_{\text{Al}}^{\text{revis}}$ (км/с)
[46]	27.16 ± 0.41	18.24	34.39 ± 0.69	24.12	23.89 ± 0.65	24.57 ± 0.63
[47]	30.60 ± 0.43	21.10	39.41 ± 0.63	28.44	27.57 ± 0.60	28.18 ± 0.65

Таблица В.2 — Ударно-волновые параметры в железном эталоне и в исследуемом образце алюминия.

Источ- ник	D_{Fe} (км/с)	$U_{\text{Fe}}^{\text{theor}}$ (км/с)	D_{Al} (км/с)	$U_{\text{Al}}^{\text{theor}}$ (км/с)	$U_{\text{Al}}^{\text{of ref}}$ (км/с)	$U_{\text{Al}}^{\text{revis}}$ (км/с)
[188]	11.69±0.45	5.009	13.87±0.44	6.606	6.600 ¹ ±0.329 ²	6.703±0.560
[188]	12.90±0.46	5.910	15.59±0.38	8.096	7.650 ¹ ±0.330 ²	7.828±0.566
[188]	15.02±0.54	7.490	17.81±0.49	10.02	9.780 ¹ ±0.443 ²	9.903±0.680
[188]	16.17±0.48	8.347	19.17±0.51	11.20	11.02 ¹ ±0.44 ²	11.01±0.62
[188]	17.08±0.40	9.027	19.75±0.40	11.70	12.14 ¹ ±0.38 ²	11.96±0.52
[188]	22.69±0.49	13.30	26.45±0.44	17.46	17.70 ¹ ±0.48 ²	17.42±0.66
[189]	17.35±0.30	9.229	20.90±0.40	12.70	12.20±0.31 ²	12.09±0.40
[190]	20.19±0.25	11.37	24.17±0.40	15.52	15.08±0.31 ²	14.85±0.35
[57]	36.77±0.50	24.86	43.57±0.60	32.05	30.72±0.59 ²	31.94±0.74
[57]	41.79±0.60	29.13	49.45±0.70	37.13	36.16±0.73 ²	37.23±0.88
[57]	42.63±0.70	29.84	50.58±0.70	38.10	36.89±0.79 ²	38.09±1.01
[57]	54.90±0.60	40.20	65.22±0.60	50.53	49.36±0.71 ²	50.85±0.85
[57]	62.65±0.60	46.65	75.03±0.70	58.72	56.96±0.76 ²	58.70±0.86
[57]	66.74±0.60	50.03	80.11±0.80	62.93	60.99±0.82 ²	62.83±0.88
[57]	71.25±0.60	53.73	85.98±0.80	67.77	65.40±0.82 ²	67.32±0.87
[57]	88.20±0.70	67.45	107.1±0.9	84.98	81.91±0.95 ²	84.19±1.00
[187]	120.0±2.0	92.82	147.0±2.0	116.8	116.7±2.5 ²	115.6±2.8
[187]	286.0±4.0	230.0	353.0±4.0	279.7	283.2±5.1 ²	284.6±5.3
[187]	291.0±5.0	234.0	366.0±6.0	290.3	288.3±6.8 ²	288.1±6.7
[187]	298.0±4.0	239.5	379.0±5.0	300.8	293.6±5.5 ²	294.0±5.2
[187]	344.0±6.0	276.4	441.0±6.0	350.1	338.9±7.5 ²	338.5±8.2

¹ Значения $U_{\text{Al}}^{\text{of ref}}$ из работы [199].

² Погрешность рассчитана как $\Delta U/U = \sqrt{(\Delta D_{\text{Fe}}/D_{\text{Fe}})^2 + (\Delta D_{\text{Al}}/D_{\text{Al}})^2}$.

Список литературы

1. *Кадацкий, М. А.* Термодинамические свойства латуни при высоких температурах в рамках модели Хартри–Фока–Слэтера / М. А. Кадацкий, К. В. Хищенко // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. — 2014. — Т. 4, № 3. — С. 67–73.
2. *Kadatskiy, M. A.* Comparison of Hugoniot calculated for aluminum in the framework of three quantum-statistical models / M. A. Kadatskiy, K. V. Khishchenko // Journal of Physics: Conference Series. — 2015. — Vol. 653. — P. 012079.
3. *Kadatskiy, M. A.* Shock compressibility of iron calculated in the framework of quantum-statistical models with different ionic parts / M. A. Kadatskiy, K. V. Khishchenko // Journal of Physics: Conference Series. — 2016. — Vol. 774. — P. 012005.
4. *Kadatskiy, M. A.* Theoretical investigation of the shock compressibility of copper in the average-atom approximation / M. A. Kadatskiy, K. V. Khishchenko // Physics of Plasmas. — 2018. — Vol. 25, no. 11. — P. 112701.
5. *Kadatskiy, M. A.* Quantum-statistical calculations of the thermodynamic properties of molybdenum at high energy densities / M. A. Kadatskiy // High Energy Density Physics. — 2019. — Vol. 33. — P. 100700.
6. Application of quantum-statistical methods to studies of thermodynamic and radiative processes in hot dense plasmas / N. Y. Orlov [et al.] // Matter and Radiation at Extremes. — 2019. — Vol. 4, no. 5. — P. 054403.
7. *Кадацкий, М. А.* Расчет термодинамических свойств смеси химических элементов по модели Хартри–Фока–Слэтера / М. А. Кадацкий, К. В. Хищенко // Труды 56-й Научной Конференции МФТИ: Всероссийской

- научной конференции «Актуальные проблемы фундаментальных и прикладных наук в современном информационном обществе», Всероссийской молодежной научно-инновационной конференции «Физикоматематические науки: актуальные проблемы и их решения». Молекулярная и Химическая Физика. — М. : МФТИ, 2013. — С. 17–18.
8. *Kadatskiy, M. A.* Equation-of-state calculations for a mixture of elements based on Hartree–Fock–Slater model / М. А. Kadatskiy, К. V. Khishchenko // XXIX Int. Conf. on Equations of State for Matter. March 1–6, 2014, Elbrus, Russia. Book of Abstracts / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Moscow : Publishing Group «Granica», 2014. — P. 22–23.
 9. *Кадатский, М. А.* Расчет ударных адиабат для смеси химических элементов по модели Хартри–Фока–Слэтера / М. А. Кадатский, К. В. Хищенко // Забабахинские Научные Чтения: Сборник Материалов XII Международной Конференции 02–06 Июня 2014. — Снежинск : Издательство РФЯЦ–ВНИИТФ, 2014. — С. 204.
 10. *Кадатский, М. А.* Расчет ударных адиабат диоксида кремния по модели Хартри–Фока–Слэтера / М. А. Кадатский, К. В. Хищенко // XV Международная Конференция Супервычисления и Математическое Моделирование, Саров, 13–17 октября, 2014. Тезисы. — Саров : ФГУП РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2014. — С. 74.
 11. *Кадатский, М. А.* Расчет ударных адиабат для SiO_2 по модели Хартри–Фока–Слэтера / М. А. Кадатский, К. В. Хищенко // Материалы XIV Российской Конференции (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-14). Т. 2. — Казань : Отечество, 2014. — С. 271.
 12. *Kadatskiy, M. A.* Hugoniot calculation for CH and CH_2 based on Hartree–Fock–Slater model / М. А. Kadatskiy, К. V. Khishchenko // XXX Int. Conf.

- on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. March 1–6, 2015, Elbrus, Russia. Book of Abstracts / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Moscow : ИИТ RAS, 2015. — P. 248.
13. *Кадацкий, М. А.* Расчёт ударных адиабат кремнезема и железа по модели Хартри–Фока–Слэтера / М. А. Кадацкий, К. В. Хищенко // XVII Харитоновские Тематические Научные Чтения. Саров, Россия, 23–27 марта 2015 г. Сборник Тезисов Докладов. — Саров : ФГУП РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2015. — С. 141–142.
 14. *Kadatskiy, M. A.* Thermodynamic properties of hot dense CH and CH₂ plasmas based on quantum-statistical models / M. A. Kadatskiy, K. V. Khishchenko // ICHED 2015 Abstract Book. August 23–27, 2015, San Diego, California. — 2015. — P. 34.
 15. *Kadatskiy, M. A.* Shock compressibility of SiO₂ calculated in the framework of quantum-statistical models / M. A. Kadatskiy, K. V. Khishchenko // Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics. November 27–28, 2015, Moscow, Russia. Book of Abstracts / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Moscow : ИИТ RAS, 2015. — P. 15–16.
 16. *Kadatskiy, M. A.* Equation of state calculation for LiH and LiD based on quantum-statistical models / M. A. Kadatskiy, K. V. Khishchenko // XXXI Int. Conf. on Equations of State for Matter. March 1–6, 2016, Elbrus, Russia. Book of Abstracts / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Moscow : ИИТ RAS, 2016. — P. 42.
 17. *Кадацкий, М. А.* Расчет ударной сжимаемости железа и его сплавов в широком диапазоне плотностей и температур / М. А. Кадацкий, К. В. Хищенко // Труды 59-й Всероссийской Научной Конференции МФТИ. Молекулярная и химическая физика / под ред. В. М. Некипелов, В. А. Яворский. — М. : МФТИ, 2016. — С. 87.

18. *Kadatskiy, M. A.* Quantum-statistical calculations of shock compressibility of three metals at high pressures / М. А. Kadatskiy, К. В. Khishchenko // XXXII Int. Conf. on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. March 1–6, 2017, Elbrus, Russia. Book of Abstracts / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Moscow : JИТ RAS, 2017. — P. 248.
19. *Када́тский, М. А.* Влияние оболочечных эффектов на ударные адиабаты металлов при высоких давлениях и температурах / М. А. Када́тский, К. В. Хищенко // Забабахинские Научные Чтения: Сборник Материалов XIII Международной Конференции 20–24 Марта 2017. — Снежинск : Издательство РФЯЦ–ВНИИТФ, 2017. — С. 188–189.
20. *Када́тский, М. А.* Квантово-статистический расчет ударной сжимаемости меди и её сплавов в широком диапазоне давлений / М. А. Када́тский, К. В. Хищенко // XIX Харитоновские Тематические Научные Чтения. Саратов, Россия, 17–21 апреля 2017 г. Сборник Тезисов Докладов. — Саратов : ФГУП РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2017. — С. 137–138.
21. *Морген, М. В.* Квантово-статистический расчёт изоэнтроп разгрузки металлов при высоких плотностях энергии / М. В. Морген, М. А. Када́тский, К. В. Хищенко // Труды 60-й Всероссийской Научной Конференции МФТИ. 20–26 Ноября 2017 г. Электроника, Фотоника и Молекулярная Физика. — М. : МФТИ, 2017. — С. 66–67.
22. *Када́тский, М. А.* Теоретическое описание относительной сжимаемости алюминия и меди в сильных ударных волнах / М. А. Када́тский, К. В. Хищенко // Труды 60-й Всероссийской Научной Конференции МФТИ. 20–26 Ноября 2017 г. Электроника, Фотоника и Молекулярная Физика. — М. : МФТИ, 2017. — С. 69–70.
23. *Kadatskiy, M. A.* Quantum-statistical calculation of the relative compressibility of Al and Cu in strong shock waves / М. А. Kadatskiy, К. В. Khishchenko // Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics. November 29–30, 2017, Moscow, Russia. Book of Abstracts / ed. by

- V. E. Fortov, I. L. Iosilevskiy, P. R. Levashov. — Moscow : JIHT RAS, 2017. — P. 15—16.
24. *Kadatskiy, M. A.* Theoretical investigation of the relative compressibility of metals in strong shock waves / M. A. Kadatskiy, K. V. Khishchenko // XXXIII Int. Conf. on Equations of State for Matter. March 1–6, 2018, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia. Book of Abstracts / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Moscow : JIHT RAS, 2018. — P. 55.
25. *Kadatskiy, M.* Influence of electron shell effects on compressibility of substances in strong shock waves / M. Kadatskiy, K. Khishchenko // 16th Int. Conf. on the Physics of Non-Ideal Plasmas. September 24–28, 2018, Saint-Malo, France. Book of Abstracts / ed. by J. Cl erouin [et al.]. — 2018. — P. 87.
26. *Кадацкий, М. А.* Квантово-статистический расчёт электронных теплоёмкостей высокотемпературной плазмы / М. А. Кадацкий, К. В. Хищенко // Труды 61-й Всероссийской Научной Конференции МФТИ. 19–25 Ноября 2018 года. Электроника, Фотоника и Молекулярная Физика. — М. : МФТИ, 2018. — С. 60—61.
27. *Кадацкий, М. А.* Изоэнтропы расширения ударно-сжатого молибдена в приближении среднего атома / М. А. Кадацкий, К. В. Хищенко // XXI Харитоновские Тематические Научные Чтения. Саров, Россия, 15–19 апреля 2019 г. Сборник Тезисов Докладов. — Саров : ФГУП РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2019. — С. 129—130.
28. *Никифоров, А. Ф.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2000.

29. *Орлов, Н. Ю.* Метод расчёта самосогласованных потенциалов для смеси химических элементов / Н. Ю. Орлов // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1986. — Т. 26, № 8. — С. 1215—1222.
30. *White, H. C.* Atomic force constants of copper from Feynman's theorem / H. C. White // Physical Review. — 1958. — Vol. 112, no. 4. — P. 1092—1105.
31. *Fermi, E.* Statistical method to determine some properties of atoms / E. Fermi // Rend. Accad. Naz. Lincei. — 1927. — Vol. 6. — P. 602—607.
32. *Thomas, L. H.* The calculation of atomic fields / L. H. Thomas // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — Cambridge, 1927. — Vol. 23, no. 5. — P. 542—548.
33. *Feynman, R. P.* Equations of state of elements based on the generalized Fermi–Thomas theory / R. P. Feynman, N. Metropolis, E. Teller // Physical Review. — 1949. — Vol. 75, no. 10. — P. 1561—1573.
34. *Milne, E. A.* The total energy of binding of a heavy atom / E. A. Milne // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — 1927. — Vol. 23, no. 7. — P. 794—799.
35. *Baker, E. B.* The application of the Fermi–Thomas statistical model to the calculation of potential distribution in positive ions / E. B. Baker // Physical Review. — 1930. — Vol. 36, no. 4. — P. 630—647.
36. *Бушман, А. В.* Модели уравнения состояния вещества / А. В. Бушман, В. Е. Фортов // Успехи физических наук. — 1983. — Т. 140, № 6. — С. 177—232.
37. *Dirac, P. A. M.* Note on exchange phenomena in the Thomas atom / P. A. M. Dirac // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — 1930. — Vol. 26, no. 3. — P. 376—385.
38. *Cowan, R. D.* Extension of the Thomas–Fermi–Dirac statistical theory of the atom to finite temperatures / R. D. Cowan, J. Ashkin // Physical Review. — 1957. — Vol. 105, no. 1. — P. 144—157.

39. *Киржниц, Д. А.* Квантовые поправки к уравнению Томаса–Ферми / Д. А. Киржниц // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1957. — Т. 32, № 1. — С. 115–123.
40. *Киржниц, Д. А.* О границах применимости квазиклассического уравнения состояния вещества / Д. А. Киржниц // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1958. — Т. 35, № 6. — С. 1545–1557.
41. *Калиткин, Н. Н.* Модель атома Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками / Н. Н. Калиткин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1960. — Т. 38, № 5. — С. 1534–1540.
42. Динамическая сжимаемость и уравнение состояния железа при высоких давлениях / Л. В. Альтшулер [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1958. — Т. 34, № 4. — С. 847–885.
43. *Калиткин, Н. Н.* Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии : Препринт / Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина ; Институт прикладной математики Академии наук СССР. — М., 1975. — № 35.
44. *Dyachkov, S.* Region of validity of the finite-temperature Thomas–Fermi model with respect to quantum and exchange corrections / S. Dyachkov, P. Levashov // Physics of Plasmas. — 2014. — Vol. 21, no. 5. — P. 052702.
45. *Holian, K. S.* Hydrodynamic simulations of hypervelocity impacts / K. S. Holian, B. L. Holian // International Journal of Impact Engineering. — 1989. — Vol. 8, no. 2. — P. 115–132.
46. *Ragan, C. E.* Shock compression measurements at 1 to 7 TPa / C. E. Ragan // Physical Review A. — 1982. — Vol. 25, no. 6. — P. 3360–3375.
47. *Ragan, C. E.* Shock-wave experiments at threefold compression / C. E. Ragan // Physical Review A. — 1984. — Vol. 29, no. 3. — P. 1391–1402.

48. *Scott, J. M. C.* LXXXII. The binding energy of the Thomas–Fermi atom / J. M. C. Scott // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. — 1952. — Vol. 43, no. 343. — P. 859–867.
49. *Weizsäcker, C. F. v.* Zur theorie der kernmassen / C. F. v. Weizsäcker // Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei. — 1935. — Vol. 96, no. 7. — P. 431–458.
50. *Калиткин, Н. Н.* Квантово-статистическое уравнение состояния / Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина // Физика плазмы. — 1976. — Т. 2, № 5. — С. 858–868.
51. *More, R. M.* Quantum-statistical model for high-density matter / R. M. More // Physical Review A. — 1979. — Vol. 19, no. 3. — P. 1234–1246.
52. *Никифоров, А. Ф.* Решение уравнений Томаса–Ферми для смеси веществ методом прогонки с итерациями / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров // Вопросы атомной науки и техники. Серия методика и программы численного решения задач математической физики. — 1982. — Вып. 1. — С. 12–17.
53. *Калиткин, Н. Н.* Квантово-статистические ударные адиабаты пористых веществ / Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина // Математическое моделирование. — 1998. — Т. 10, № 7. — С. 111–123.
54. *Калиткин, Н. Н.* Ударно-волновые стандарты / Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина // Математическое моделирование. — 1999. — Т. 11, № 1. — С. 45–60.
55. *Калиткин, Н. Н.* Главные ударные адиабаты 10 металлов / Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина, А. И. Фунтиков // Математическое моделирование. — 2002. — Т. 14, № 10. — С. 27–42.
56. *Киржниц, Д. А.* Статистическая модель вещества / Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик, Г. В. Шпатаковская // Успехи физических наук. — 1975. — Т. 117, № 9. — С. 3–47.

57. Экспериментальное подтверждение оболочечных эффектов на ударных адиабатах алюминия и свинца / Е. Н. Аврорин [и др.] // Письма в ЖЭТФ. — 1986. — Т. 43, № 5. — С. 241—244.
58. *Pain, J. C.* Shell-structure effects on high-pressure Rankine–Hugoniot shock adiabats / J. C. Pain // High Energy Density Physics. — 2007. — Vol. 3, no. 1/2. — P. 204—210.
59. *Киржниц, Д. А.* Осцилляционные эффекты атомной структуры / Д. А. Киржниц, Г. В. Шпатаковская // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1972. — Т. 62, № 6. — С. 2082—2086.
60. *Киржниц, Д. А.* Осцилляции упругих параметров сжатого вещества / Д. А. Киржниц, Г. В. Шпатаковская // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1974. — Т. 66, № 5. — С. 1828—1843.
61. *Шпатаковская, Г. В.* Оболочечные эффекты в термодинамике невырожденной плазмы / Г. В. Шпатаковская // Теплофизика высоких температур. — 1985. — Т. 23, № 1. — С. 42—49.
62. *Shpatakovskaya, G. V.* Shell effects in the equation of state of metals / G. V. Shpatakovskaya, E. A. Kuz'menkov // International Journal of Thermophysics. — 1992. — Vol. 13, no. 2. — P. 315—329.
63. *Шпатаковская, Г. В.* Квазиклассическая модель строения вещества / Г. В. Шпатаковская // Успехи физических наук. — 2012. — Т. 182, № 5. — С. 457—494.
64. *Shpatakovskaya, G. V.* Shell correction to the Thomas–Fermi statistical model of plasma with different atomic composition at high and low temperatures / G. V. Shpatakovskaya, V. Y. Karpov // Journal of Physics: Conference Series. — 2015. — Vol. 653, no. 1. — P. 012074.
65. *Dyachkov, S.* Region of validity of the Thomas–Fermi model with corrections / S. Dyachkov, P. Levashov, D. Minakov // Physics of Plasmas. — 2016. — Vol. 23, no. 11. — P. 112705.

66. *Zink, J. W.* Shell structure and the Thomas–Fermi equation of state / J. W. Zink // *Physical Review*. — 1968. — Vol. 176, no. 1. — P. 279–284.
67. *Калиткин, Н. Н.* О термодинамических асимптотиках моделей вещества в экстремальных условиях : Препринт / Н. Н. Калиткин ; Институт прикладной математики Академии наук СССР. — М., 1986. — № 43.
68. *Hartree, D. R.* The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods / D. R. Hartree // *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. — 1928. — Vol. 24, no. 1. — P. 89–110.
69. *Fock, V.* Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems / V. Fock // *Zeitschrift für Physik*. — 1930. — Vol. 61, no. 1/2. — P. 126–148.
70. *Matsubara, T.* A new approach to quantum-statistical mechanics / T. Matsubara // *Progress of Theoretical Physics*. — 1955. — Vol. 14, no. 4. — P. 351–378.
71. *Slater, J. C.* A Simplification of the Hartree-Fock Method / J. C. Slater // *Physical Review*. — 1951. — Feb. — Vol. 81, no. 3. — P. 385–390.
72. *Kohn, W.* Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Physical Review*. — 1965. — Vol. 140, 4A. — A1133.
73. *Gunnarsson, O.* Descriptions of exchange and correlation effects in inhomogeneous electron systems / O. Gunnarsson, M. Jonson, B. I. Lundqvist // *Physical Review B*. — 1979. — Vol. 20, no. 8. — P. 3136–3164.
74. *Никифоров, А. Ф.* Модифицированная модель Хартри–Фока–Слэтера для вещества с заданной температурой и плотностью / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров // *Вопросы атомной науки и техники. Серия методики и программы численного решения задач математической физики*. — 1979. — Вып. 4. — С. 16–26.

75. *Gupta, U.* Inhomogeneous electron gas at nonzero temperatures: Exchange effects / U. Gupta, A. K. Rajagopal // *Physical Review A*. — 1980. — Vol. 21, no. 6. — P. 2064—2068.
76. *Никифоров, А. Ф.* Модифицированная модель Хартри–Фока–Слэтера и ее применение для получения уравнений состояния вещества в области высоких температур / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров // *Математическое моделирование. Физико-химические свойства веществ* / под ред. А. А. Самарский, Н. Н. Калиткин. — М. : Наука, 1989. — С. 162.
77. *Rozsnyai, B. F.* Relativistic Hartree–Fock–Slater calculations for arbitrary temperature and matter density / B. F. Rozsnyai // *Physical Review A*. — 1972. — Vol. 5, no. 3. — P. 1137—1149.
78. *Синько, Г. В.* Использование метода самосогласованного поля для расчета термодинамических функций электронов в простых веществах / Г. В. Синько // *Теплофизика высоких температур*. — 1983. — Т. 21, № 6. — С. 1041—1052.
79. *Rozsnyai, B. F.* Shock Hugoniot based on the self-consistent average atom (SCAA) model. Theory and experiments. (Second revision) / B. F. Rozsnyai // *High Energy Density Physics*. — 2012. — Vol. 8, no. 1. — P. 88—100.
80. Theory and experiment for ultrahigh pressure shock Hugoniot / B. F. Rozsnyai [et al.] // *Physics Letters A*. — 2001. — Vol. 291, no. 4/5. — P. 226—231.
81. *Perrot, F.* Hartree-Fock study of the ground-state energy and band structure of metallic copper / F. Perrot // *Physical Review B*. — 1975. — Vol. 11, no. 12. — P. 4872—4884.
82. *Костерин, Н. Н.* Построение кривых холодного сжатия с использованием квазизонной модели и пакета ABINIT / Н. Н. Костерин, В. Г. Новиков, А. С. Грушин // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. — 2012. — № 48. — С. 24.

83. *Воробьёв, В. С.* Исследование фазовых переходов в цезии с помощью модели среднего атома / В. С. Воробьёв, А. С. Грушин, В. Г. Новиков // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. — 2016. — № 100. — С. 16.
84. *Vorob'ev, V. S.* Communication: Shock adiabat of atomic nitrogen at megabar pressures / V. S. Vorob'ev, A. S. Grushin, V. G. Novikov // The Journal of Chemical Physics. — 2012. — Vol. 137, no. 3. — P. 031102.
85. *Новиков, В. Г.* Ударное сжатие лития, алюминия и железа по модели МХФС : Препринт / В. Г. Новиков ; Институт прикладной математики Академии наук СССР. — М., 1985. — № 133.
86. *Lieberman, D. A.* Self-consistent field model for condensed matter / D. A. Liberman // Physical Review B. — 1979. — Vol. 20, no. 12. — P. 4981—4989.
87. *Lieberman, D. A.* INFERNO: A better model of atoms in dense plasmas / D. A. Liberman // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. — 1982. — Vol. 27, no. 3. — P. 335—339.
88. Purgatorio—a new implementation of the Inferno algorithm / B. Wilson [et al.] // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. — 2006. — Vol. 99, no. 1—3. — P. 658—679.
89. *Pénicaud, M.* An average atom code for warm matter: application to aluminum and uranium / M. Pénicaud // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2009. — Vol. 21, no. 9. — P. 095409.
90. *Bar-Shalom, A.* EOSTA—an improved EOS quantum mechanical model in the STA opacity code / A. Bar-Shalom, J. Oreg, M. Klapisch // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. — 2006. — Vol. 99, no. 1—3. — P. 35—54.
91. *Novikov, V. G.* Calculations of the equation of state by the Liberman mode / V. G. Novikov, A. A. Ovechkin // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2011. — Vol. 3, no. 3. — P. 290—298.

92. *Новиков, В. Г.* Роль резонансных состояний при выдавливании дискретных уровней в непрерывный спектр / В. Г. Новиков, А. А. Овечкин // Препринты Института прикладной математики им. МВ Келдыша РАН. — 2009. — № 31. — С. 22.
93. *More, R. M.* Properties of resonance wave functions / R. M. More, E. Gerjuoy // Physical Review A. — 1973. — Vol. 7, no. 4. — P. 1288.
94. *Ovechkin, A.* Transport and dielectric properties of dense ionized matter from the average-atom RESEOS model / A. Ovechkin, P. Loboda, A. Falkov // High Energy Density Physics. — 2016. — Vol. 20. — P. 38—54.
95. Equation of state, occupation probabilities and conductivities in the average atom purgatorio code / P. A. Sterne [et al.] // High Energy Density Physics. — 2007. — Vol. 3, no. 1/2. — P. 278—282.
96. *Овечкин, А. А.* Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля / А. А. Овечкин, В. Г. Новиков, А. С. Грушин // Теплофизика высоких температур. — 2011. — Т. 49, № 6. — С. 845—855.
97. RESEOS—A model of thermodynamic and optical properties of hot and warm dense matter / A. A. Ovechkin [et al.] // High Energy Density Physics. — 2014. — Vol. 13. — P. 20—33.
98. *Blenski, T.* Variational theory of average-atom and superconfigurations in quantum plasmas / T. Blenski, B. Cichocki // Physical Review E. — 2007. — Vol. 75, no. 5. — P. 056402.
99. *Piron, R.* Variational-average-atom-in-quantum-plasmas (VAAQP) code and virial theorem: Equation-of-state and shock-Hugoniot calculations for warm dense Al, Fe, Cu, and Pb / R. Piron, T. Blenski // Physical Review E. — 2011. — Vol. 83, no. 2. — P. 026403.
100. *Piron, R.* Average-atom model calculations of dense-plasma opacities: Review and potential applications to white-dwarf stars / R. Piron, T. Blenski // Contributions to Plasma Physics. — 2018. — Vol. 58, no. 1. — P. 30—41.

101. *Piron, R.* Variational Average-Atom in Quantum Plasmas (VAAQP)—A check of thermodynamic consistency / R. Piron, T. Blenski, B. Cichocki // High Energy Density Physics. — 2009. — Vol. 5, no. 4. — P. 258—262.
102. *Starrett, C. E.* A variational average atom approach to closing the quantum Ornstein–Zernike relations / C. E. Starrett, D. Saumon // High Energy Density Physics. — 2012. — Vol. 8, no. 1. — P. 101—104.
103. *Starrett, C. E.* Fully variational average atom model with ion-ion correlations / C. E. Starrett, D. Saumon // Physical Review E. — 2012. — Vol. 85, no. 2. — P. 026403.
104. *Starrett, C. E.* A simple method for determining the ionic structure of warm dense matter / C. E. Starrett, D. Saumon // High Energy Density Physics. — 2014. — Vol. 10. — P. 35—42.
105. *Ovechkin, A. A.* Plasma opacity calculations using the Starrett and Saumon average-atom model with ion correlations / A. A. Ovechkin, P. A. Loboda, A. L. Falkov // High Energy Density Physics. — 2019. — Vol. 30. — P. 29—40.
106. *Ландау, Л. Д.* Статистическая физика. Ч. I. Т. 5 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — 5-е изд. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2002. — (Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т.)
107. *Carnahan, N. F.* Equation of state for nonattracting rigid spheres / N. F. Carnahan, K. E. Starling // The Journal of Chemical Physics. — 1969. — Vol. 51, no. 2. — P. 635—636.
108. *Hansen, J. P.* Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. I. Equilibrium Properties of the Classical One-Component Plasma / J. P. Hansen // Physical Review A. — 1973. — Vol. 8, no. 6. — P. 3096—3109.
109. *Palmer, R. G.* Exact solution of the mean spherical model for charged hard spheres in a uniform neutralizing background / R. G. Palmer, J. D. Weeks // The Journal of Chemical Physics. — 1973. — Vol. 58, no. 10. — P. 4171—4174.

110. *Калиткин, Н. Н.* Модель осциллирующих ядер / Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина // Численные методы механики сплошной среды. — 1977. — Т. 8, № 6. — С. 46—53.
111. Расчёты уравнений состояния алюминия в области высоких температур на основе модифицированной модели Хартри–Фока–Слэтера : Препринт / А. Ф. Никифоров [и др.] ; Институт прикладной математики Академии наук СССР. — М., 1989. — № 137.
112. *Pain, J. C.* Equation-of-state model for shock compression of hot dense matter / J. C. Pain // Physics Letters A. — 2007. — Vol. 362, no. 2/3. — P. 120—124.
113. *Becke, A. D.* Perspective: Fifty years of density-functional theory in chemical physics / A. D. Becke // The Journal of Chemical Physics. — 2014. — Vol. 140, no. 18. — 18A301.
114. *Kresse, G.* Ab initio molecular dynamics for open-shell transition metals / G. Kresse, J. Hafner // Physical Review B. — 1993. — Vol. 48, no. 17. — P. 13115.
115. *Фортов, В. Е.* Уравнения состояния вещества: от идеального газа до кварк-глюонной плазмы / В. Е. Фортов. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2013.
116. *Surh, M. P.* First principles molecular dynamics of dense plasmas / M. P. Surh, T. W. Barbee III, L. H. Yang // Physical Review Letters. — 2001. — Vol. 86, no. 26. — P. 5958.
117. Pseudopotential and full-electron DFT calculations of thermodynamic properties of electrons in metals and semiempirical equations of state / P. R. Levashov [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2010. — Vol. 22, no. 50. — P. 505501.

118. Pressure and electrical resistivity measurements on hot expanded nickel: Comparisons with quantum molecular dynamics simulations and average atom approaches / J. Clerouin [et al.] // *Physical Review E*. — 2010. — Vol. 82, no. 4. — P. 046402.
119. Pressure and Electrical Resistivity Measurements on Hot Expanded Metals: Comparisons with Quantum Molecular Dynamics Simulations and Average-Atom Approaches / J. Cl erouin [et al.] // *Contributions to Plasma Physics*. — 2012. — Vol. 52, no. 1. — P. 17–22.
120. Thermodynamic functions of the heated electron subsystem in the field of cold nuclei / G. V. Sin'ko [et al.] // *High Energy Density Physics*. — 2013. — Vol. 9, no. 2. — P. 309–314.
121. *Faussurier, G.* Pressure in warm and hot dense matter using the average-atom model / G. Faussurier, C. Blancard // *Physical Review E*. — 2019. — Vol. 99, no. 5. — P. 053201.
122. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas–Fermi model / O. P. Shemyakin [et al.] // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2010. — Vol. 43, no. 33. — P. 335003.
123. *Никифоров, А. Ф.* Применение фазового метода для определения собственных значений энергии / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков // *Математическое моделирование*. — 1998. — Т. 10, № 10. — С. 64–78.
124. *Falkov, A. L.* Ion-correlative model of dense mixture plasmas: Structural and thermodynamical properties / A. L. Falkov, A. A. Oveckin, P. A. Loboda // *XXXII Int. Conf. on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. Book of Abstracts* / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Moscow : JIHT RAS, 2017. — P. 282.
125. Femtosecond optical diagnostics and hydrodynamic simulation of Ag plasma created by laser irradiation of a solid target / M. E. Veysman [et al.] //

- Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2008. — Vol. 41, no. 12. — P. 125704.
126. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий / А. В. Бушман [и др.]. — Черногоровка : ОИХФ АН СССР, 1988.
127. *Зельдович, Я. Б.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений / Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. — 3-е изд. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2008.
128. *Киржниц, Д. А.* Экстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) / Д. А. Киржниц // Успехи физических наук. — 1971. — Т. 104, № 7. — С. 489—508.
129. Near-absolute Hugoniot measurements in aluminum to 500 GPa using a magnetically accelerated flyer plate technique / M. D. Knudson [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2003. — Vol. 94, no. 7. — P. 4420—4431.
130. Абсолютные измерения ударной сжимаемости алюминия при давлениях $P \gtrsim 1$ ТПа / В. А. Симоненко [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1985. — Т. 88, № 4. — С. 1452—1459.
131. Ударная сжимаемость алюминия при давлении 10 Мбар / Л. П. Волков [и др.] // Письма в ЖЭТФ. — 1980. — Т. 31, № 11. — С. 623—626.
132. Shock-wave compression of aluminum at pressures of 1.7 TPa / M. A. Podurets [et al.] // High Temperature. — 1994. — Vol. 32, no. 6. — P. 890—892.
133. *Simonenko, V. A.* Experimental measurements of equation of state for metals to 200 Mbar and comparison with Thomas–Fermi and other theoretical models / V. A. Simonenko // High Pressure Science and Technology. — 1990. — Vol. 5, no. 1—6. — P. 816—818.
134. Уравнения состояния алюминия, меди и свинца для области высоких давлений / Л. В. Альтшулер [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1960. — Т. 38, № 3. — С. 790—798.

135. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах / С. Б. Кормер [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1962. — Т. 42, № 3. — С. 686—702.
136. *Bakanova, A. A.* Shock compressibility of porous tungsten, molybdenum, copper, and aluminum in the low pressure domain / A. A. Bakanova, I. P. Dudoladov, Y. N. Sutulov // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. — 1974. — Vol. 15, no. 2. — P. 241—245.
137. Shock adiabatic curves of metals / L. V. Al'tshuler [et al.] // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. — 1981. — Vol. 22, no. 2. — P. 145—169.
138. *Mitchell, A. C.* Shock compression of aluminum, copper, and tantalum / A. C. Mitchell, W. J. Nellis // Journal of Applied Physics. — 1981. — Vol. 52, no. 5. — P. 3363—3374.
139. *Lomonosov, I. V.* Multi-phase equation of state for aluminum / I. V. Lomonosov // Laser and Particle Beams. — 2007. — Vol. 25, no. 4. — P. 567—584.
140. *Shemyakin, O. P.* Equation of state of Al based on the Thomas–Fermi model / O. P. Shemyakin, P. R. Levashov, K. V. Khishchenko // Contributions to Plasma Physics. — 2012. — Vol. 52, no. 1. — P. 37—40.
141. Quantum molecular dynamics simulation of shock-wave experiments in aluminum / D. V. Minakov [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2014. — Vol. 115, no. 22. — P. 223512.
142. *Driver, K. P.* Path integral Monte Carlo simulations of warm dense aluminum / K. P. Driver, F. Soubiran, B. Militzer // Physical Review E. — 2018. — Vol. 97, no. 6. — P. 063207.

143. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ / под ред. Р. Ф. Трунин. — 2-е изд. — Саров : РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
144. *Warnes, R. H.* Shock wave compression of three polynuclear aromatic compounds / R. H. Warnes // *The Journal of Chemical Physics*. — 1970. — Vol. 53, no. 3. — P. 1088—1094.
145. Shock-wave compressions of twenty-seven metals. Equations of state of metals / J. M. Walsh [et al.] // *Physical Review*. — 1957. — Vol. 108, no. 2. — P. 196—216.
146. *Альтшулер, Л. В.* Динамическая сжимаемость металлов при давлениях от четырехсот тысяч до четырех миллионов атмосфер / Л. В. Альтшулер, К. К. Крупников, М. И. Бражник // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 1958. — Т. 34, № 4. — С. 886—893.
147. *McQueen, R. G.* Equation of state for nineteen metallic elements from shock-wave measurements to two megabars / R. G. McQueen, S. P. Marsh // *Journal of Applied Physics*. — 1960. — Vol. 31, no. 7. — P. 1253—1269.
148. *Skidmore, I. C.* Experimental equation of state data for uranium and its interpretation in the critical region / I. C. Skidmore, E. Morris // *Thermodynamics of Nuclear Materials*. — 1962. — P. 173—216.
149. *Marsh, S. P.* LASL shock Hugoniot data. Vol. 5 / S. P. Marsh. — Univ of California Press, 1980.
150. *Hixson, R. S.* Shock compression of iron / R. S. Hixson, J. N. Fritz // *Shock Compression of Condensed Matter—1991*. — Elsevier, 1992. — P. 69—70.
151. Взрывные лабораторные устройства для исследования сжатия веществ в ударных волнах / Л. В. Альтшулер [и др.] // *Успехи физических наук*. — 1996. — Т. 166, № 5. — С. 575—581.
152. *Brown, J. M.* Hugoniot data for iron / J. M. Brown, J. N. Fritz, R. S. Hixson // *Journal of Applied Physics*. — 2000. — Vol. 88, no. 9. — P. 5496—5498.

153. *Альтшулер, Л. В.* Ударные адиабаты и нулевые изотермы семи металлов при высоких давлениях / Л. В. Альтшулер, А. А. Баканова, Р. Ф. Трунин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1962. — Т. 42, № 1. — С. 91—104.
154. Исследование ударной сжимаемости титана, молибдена, тантала и железа / К. К. Крупников [и др.]. — 1963.
155. Определение ударной сжимаемости железа до давлений в 10 ТПа (100 Мбар) / Р. Ф. Трунин [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1993. — Т. 103, № 6. — С. 2189—2195.
156. Сжимаемость пористых металлов в ударных волнах / Р. Ф. Трунин [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1989. — Т. 96, № 3. — С. 1024—1038.
157. Ударное сжатие пористых железа, меди и вольфрама и их уравнение состояния в области терапаскальных давлений / Р. Ф. Трунин [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1989. — Т. 95, № 2. — С. 631—641.
158. *Трунин, Р. Ф.* Ударная сжимаемость конденсированных веществ в мощных ударных волнах подземных ядерных взрывов / Р. Ф. Трунин // Успехи физических наук. — 1994. — Т. 164, № 11. — С. 1215—1237.
159. *Al'tshuler, L. V.* Strength and elasticity of iron and copper at high shock-wave compression pressures / L. V. Al'tshuler, M. I. Brazhnik, G. S. Telegin // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. — 1971. — Vol. 12, no. 6. — P. 921—926.
160. *Zaretsky, E. B.* Response of copper to shock-wave loading at temperatures up to the melting point / E. B. Zaretsky, G. I. Kanel // Journal of Applied Physics. — 2013. — Vol. 114, no. 8. — P. 083511.

161. *Dremin, A. N.* Processes occurring in solids under the action of powerful shock waves / A. N. Dremin, O. N. Breusov // Russian Chemical Reviews. — 1968. — Vol. 37, no. 5. — P. 392—402.
162. *Урлин, В. Д.* Плавление при сверхвысоких давлениях, полученных в ударной волне / В. Д. Урлин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1965. — Т. 49, № 2. — С. 485—492.
163. *Lemke, R. W.* Magnetically driven hyper-velocity launch capability at the Sandia Z accelerator / R. W. Lemke, M. D. Knudson, J. P. Davis // International Journal of Impact Engineering. — 2011. — Vol. 38, no. 6. — P. 480—485.
164. *Nellis, W. J.* Equation-of-state measurements for aluminum, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar) / W. J. Nellis, A. C. Mitchell, D. A. Young // Journal of Applied Physics. — 2003. — Vol. 93, no. 1. — P. 304—310.
165. Экспериментальное изучение термодинамики плотной плазмы металлов при высоких концентрациях энергии / Б. Л. Глушак [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1989. — Т. 96, № 4. — С. 1301—1318.
166. *Isbell, W. H.* Hugoniot equation of state measurements for eleven materials to five megabars : Report / W. H. Isbell, F. H. Shipman, A. H. Jones ; General Motors Corp., Material Science Laboratory. — Warren, MI, 1968. — MSL-68—13.
167. *McCoy, C. A.* Absolute measurement of the Hugoniot and sound velocity of liquid copper at multimegabar pressures / C. A. McCoy, M. D. Knudson, S. Root // Physical Review B. — 2017. — Vol. 96, no. 17. — P. 174109.
168. *Ragan, C. E.* Ultrahigh-pressure shock-wave experiments / C. E. Ragan // Physical Review A. — 1980. — Vol. 21, no. 2. — P. 458—463.

169. *Asimow, P. D.* Shock compression of preheated molybdenum to 300 GPa / P. D. Asimow, D. Sun, T. J. Ahrens // *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. — 2009. — Vol. 174, no. 1—4. — P. 302—308.
170. Intercomparison of pressure standards (Au, Pt, Mo, MgO, NaCl and Ne) to 2.5 Mbar / S. M. Dorfman [et al.] // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. — 2012. — Vol. 117. — B08210.
171. *Ragan III, C. E.* Shock compression of molybdenum to 2.0 TPa by means of a nuclear explosion / C. E. Ragan III, M. G. Silbert, B. C. Diven // *Journal of Applied Physics*. — 1977. — Vol. 48, no. 7. — P. 2860—2870.
172. Equation of state of Al, Cu, Mo, and Pb at shock pressures up to 2.4 TPa (24 Mbar) / A. C. Mitchell [et al.] // *Journal of Applied Physics*. — 1991. — Vol. 69, no. 5. — P. 2981—2986.
173. *Hixson, R. S.* Shock compression of tungsten and molybdenum / R. S. Hixson, J. Fritz // *Journal of Applied Physics*. — 1992. — Vol. 71, no. 4. — P. 1721—1728.
174. Molybdenum sound velocity and shear modulus softening under shock compression / J. H. Nguyen [et al.] // *Physical Review B*. — 2014. — Vol. 89, no. 17. — P. 174109.
175. X-ray diffraction of molybdenum under shock compression to 450 GPa / J. Wang [et al.] // *Physical Review B*. — 2015. — Vol. 92, no. 17. — P. 174114.
176. Ударное сжатие кварца / Г. А. Ададулов [и др.] // *Журнал прикладной механики и технической физики*. — 1962. — № 4. — С. 81—89.
177. *Альтшулер, Л. В.* Ударное сжатие периклаза и кварца и состав нижней мантии Земли / Л. В. Альтшулер, Р. Ф. Трунин, Г. В. Симаков // *Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли*. — 1965. — № 10. — С. 1—6.

178. Динамическая сжимаемость кварца и кварцита при высоких давлениях / Р. Ф. Трунин [и др.] // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. — 1971. — № 1. — С. 13—20.
179. *Knudson, M. D.* Shock compression of quartz to 1.6 TPa: Redefining a pressure standard / M. D. Knudson, M. P. Desjarlais // *Physical Review Letters*. — 2009. — Vol. 103, no. 22. — P. 225501.
180. Dissociation of liquid silica at high pressures and temperatures / D. G. Hicks [et al.] // *Physical Review letters*. — 2006. — Vol. 97, no. 2. — P. 025502.
181. *Thiel, M. v.* Compendium of Shock Wave Data. Section A2. Inorganic Compounds. Section B. Hydrocarbons : tech. rep. / M. v. Thiel, J. Shaner, E. Sallnas ; Lawrence Livermore Laboratory. — Livermore, 1977. — UCRL—50108.
182. *Трунин, Р. Ф.* Сжатие пористого кварца сильными ударными волнами / Р. Ф. Трунин, Г. В. Симаков, М. А. Подурец // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. — 1971. — № 2. — С. 33.
183. *Симаков, Г. В.* Сжатие сверхпористого кремнезема в ударных волнах / Г. В. Симаков, Р. Ф. Трунин // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. — 1990. — № 11. — С. 72.
184. Direct shock wave loading of Stishovite to 235 GPa: Implications for perovskite stability relative to an oxide assemblage at lower mantle conditions / S.-N. Luo [et al.] // *Geophysical Research Letters*. — 2002. — Vol. 29, no. 14. — P. 36—1.
185. Shock compression of stishovite and melting of silica at planetary interior conditions / M. Millot [et al.] // *Science*. — 2015. — Vol. 347, no. 6220. — P. 418—420.

186. *Knudson, M. D.* Adiabatic release measurements in aluminum from 240 to 500-GPa states on the principal Hugoniot / M. D. Knudson, J. R. Asay, C. Deeney // *Journal of Applied Physics*. — 2005. — Vol. 97, no. 7. — P. 073514.
187. Ударная сжимаемость алюминия при давлениях $P > 1$ Гбар / А. С. Владимиров [и др.] // *Письма в ЖЭТФ*. — 1984. — Т. 39, № 2. — С. 69—72.
188. Экспериментальное изучение оболочечных эффектов на ударных адиабатах конденсированных веществ / Е. Н. Аврорин [и др.] // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 1987. — Т. 93, № 2. — С. 613—626.
189. *Трунин, Р. Ф.* Ударная сжимаемость железа, алюминия и тантала при терапаскальных давлениях, полученных в лабораторных условиях / Р. Ф. Трунин, Н. В. Панов, А. Б. Медведев // *Теплофизика высоких температур*. — 1995. — Т. 33, № 2. — С. 329—331.
190. *Трунин, Р. Ф.* Сжимаемость железа, алюминия, молибдена, титана и тантала при давлениях ударных волн 1–2.5 ТПа / Р. Ф. Трунин, Н. В. Панов, А. Б. Медведев // *Письма в ЖЭТФ*. — 1995. — Т. 62, № 7. — С. 572—575.
191. *Жерноклетов, М. В.* Изэнтропа разгрузки и уравнение состояния молибдена при высоких плотностях энергии / М. В. Жерноклетов, А. Б. Медведев, Г. В. Симаков // *Химическая физика*. — 1995. — Т. 14, № 2/3. — С. 49—55.
192. *Альтшулер, Л. В.* Применение ударных волн в физике высоких давлений / Л. В. Альтшулер // *Успехи физических наук*. — 1965. — Т. 85, № 2. — С. 199—258.
193. Shock compression of molybdenum under pressures of 1.4 TPa / R. F. Trunin [et al.] // *High Temperature*. — 1994. — Vol. 32, no. 5. — P. 734—735.

194. *Levashov, P. R.* Influence of shell effects on thermodynamic properties of matter at high pressures / P. R. Levashov, D. V. Minakov // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2018. — Vol. 946, no. 1. — P. 012083.
195. Ударная сжимаемость и уравнение состояния меди в области высоких давлений / В. Н. Зубарев [и др.] // Доклады I Всесоюзного симпозиума по импульсным давлениям. Т. 1. — М. : ВНИИФТРИ, 1974. — С. 61—64.
196. *Трунин, Р. Ф.* Ударное сжатие пористой меди при мегабарных давлениях / Р. Ф. Трунин, Н. В. Панов // *Теплофизика высоких температур*. — 2000. — Т. 38, № 5. — С. 754—758.
197. Сравнительная сжимаемость меди, кадмия и свинца при высоких давлениях / Р. Ф. Трунин [и др.] // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 1969. — Т. 36, № 4. — С. 1172—1174.
198. Экспериментальная проверка модели Томаса–Ферми для металлов при высоких давлениях / Р. Ф. Трунин [и др.] // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 1972. — Т. 62, № 3. — С. 1043—1048.
199. Новые данные по сжимаемости алюминия, плексигласа и кварца, полученные в условиях сильной ударной волны подземного ядерного взрыва / Р. Ф. Трунин [и др.] // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 1995. — Т. 108, № 3. — С. 851—861.