

На правах рукописи

**Кадатский Максим Алексеевич**

**Квантово-статистический расчёт  
термодинамических свойств простых веществ  
и смесей при высоких плотностях энергии**

01.04.08 — Физика плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

Научный руководитель: **Хищенко Константин Владимирович**,  
к. ф.-м. н., с. н. с., зав. лабораторией,  
ОИВТ РАН

Официальные оппоненты: **Шпатаковская Галина Васильевна**,  
д. ф.-м. н., эксперт-советник, Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук»

**Острик Афанасий Викторович**,  
д. т. н., профессор, г. н. с., Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Защита состоится \_\_\_\_\_ 2019 г. в \_\_\_\_ на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, расположенного по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2, Экспозал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИВТ РАН.

Отзывы на автореферат просьба направлять по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2.

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 2019 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
Д 002.110.02,  
д. ф.-м. н.



М. М. Васильев

## Общая характеристика работы

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.

**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/м<sup>3</sup>). 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 связывающей 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 продолжаются 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<sup>1</sup> 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 проблемы, 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 требуются 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<sup>2</sup> согласования химических потенциалов компонент смеси. В настоящей работе один из этих методов применяется к расчётам по реализованной версии модели ХФС.

---

<sup>1</sup> *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.

<sup>2</sup> *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.

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  $\rho = 2.712$  г/см<sup>3</sup>) и молибдена ( $\rho = 10.22$  г/см<sup>3</sup>).
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 ( $\rho = 2.712$  г/см<sup>3</sup>) и Mo ( $\rho = 10.22$  г/см<sup>3</sup>) 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 SiO<sub>2</sub> 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, SiO<sub>2</sub>–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); 5<sup>th</sup> 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); 16<sup>th</sup> 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); международной конференции XXI Харитоновские тематические научные чтения «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» (Россия, Саров, 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.

**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.

**Объем 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.

## Содержание работы

**Во введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в диссертационной работе, формулируются цель и задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость работы, представлены выносимые на защиту научные положения.

**В обзоре литературы** приводится краткий исторический обзор возникновения и развития метода самосогласованного поля среднего атома. Перечислены основные модели этого метода. Приведены основные результаты работ, в том числе последних лет, где данный метод использовался для решения задачи построения ударных адиабат различных веществ в широком диапазоне параметров. Кроме того, рассказывается о месте



реализованных в диссертационной работе моделей среди других квантово-статистических методов расчёта термодинамических свойств вещества.

**Первая глава** посвящена описанию использованных в диссертации методов расчёта термодинамических зависимостей. Последовательно излагаются способы расчёта электронного вклада в термодинамику простых веществ. Показано, как с использованием рассчитанной электронной структуры, можно описать термодинамику полной системы, в том числе и для веществ сложного химического состава.

*В первом разделе* первой главы кратко излагаются теоретические основы метода самосогласованного поля среднего атома, перечисляются задействованные приближения. Приведены уравнения для определения самосогласованных атомных потенциалов  $V(r)$  и соответствующие формулы для расчётов химического потенциала  $\mu$ , электронного давления  $P_e$  и электронной внутренней энергии  $E_e$  простых веществ для заданных температур  $T$  и плотностей  $\rho$  по моделям ТФ (является простейшей из моделей в рамках квантово-статистического подхода), ТФП (улучшенная версия модели ТФ, служит начальным приближением для квантово-механических расчётов) и ХФС (с учётом зонной структуры с помощью квазипериодических граничных условий).

В рамках модели ХФС для уравнения

$$\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \int_0^{r_0} \max\{0; (V(r) + \varepsilon_0)\}^{3/2} r^2 dr = \sum_{nl} 2(2l+1) + \sum_{nlm} \int_0^{(\frac{9\pi}{2})^2} \frac{6k^2 dk}{(9\pi/2)^6}, \quad (1)$$

отвечающего за сохранение числа рассматриваемых состояний и, соответственно, определения значения величины энергии границы непрерывного спектра  $\varepsilon_0$ , представлен оригинальный алгоритм выбора номера его корня, позволивший получить гладкие термодинамические зависимости при широкодиапазонных расчётах. Приведён пример подобных расчётов, а именно представлены рассчитанные по моделям ТФ, ТФП и ХФС значения показателя адиабаты электронной подсистемы на изохоре нормальной плотности в зависимости от температуры для алюминия ( $T = 1-10^4$  эВ) и молибдена ( $T = 0.1-10^5$  эВ). Кроме того, представлены результаты расчётов по модели ХФС электронной структуры (плотность состояний и пространственное распределение электронного заряда) атома меди при температуре  $T = 10$  эВ для нормальной плотности ( $\rho = \rho_0 = 8.93$  г/см<sup>3</sup>).

*Во втором разделе* первой главы приведены уравнения моделей ИГ (является простейшим приближением, в которой учитывается только тепловое движение невзаимодействующих друг с другом ионов) и ЗТС (в которой учтено влияние конечного размера ионного остова, а в рамках приближения однокомпонентной плазмы также и взаимодействие между частицами) для расчётов давления  $P_i$  и энергии  $E_i$  ионной подсистемы.

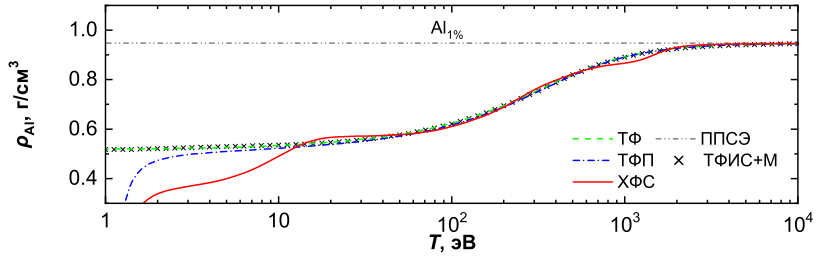


Рис. 1 — Парциальная плотность  $\rho_{Al}$  алюминия в латуни марки ЛА90-1 в зависимости от температуры  $T$  при постоянной плотности сплава  $\rho_m = 1 \text{ г/см}^3$ , рассчитанная по модели ППСЭ, ТФ, ТФП и ХФС. Для сравнения приведены результаты расчётов по модели ТФИС+М<sup>3</sup>.

Кроме того, приведено описание аддитивного приближения, используемого для расчёта давления  $P$  и удельной энергии  $E$  всей системы.

В *третьем разделе* первой главы описан алгоритм расчёта самосогласованных потенциалов для веществ, представляющих собой смесь химических элементов. Приведены уравнения модели постоянной плотности свободных электронов (ППСЭ), которая используется в качестве начального приближения для осуществления расчётов. На примере латуни марки ЛА90-1 ( $\text{Cu}_{0.9}\text{Zn}_{0.09}\text{Al}_{0.01}$ ) с общей плотностью  $\rho_m = 1 \text{ г/см}^3$  с помощью описанного алгоритма были проведены расчёты парциальных плотностей компонентов сплава. Результаты этого расчёта для алюминиевой компоненты сплава в диапазоне температур от 1 до  $10^4$  эВ представлены на рисунке 1, на котором также представлены результаты расчётов<sup>3</sup> других авторов, проведённые по квазиклассическому варианту модели Старрета–Саумона (ТФИС+М).

Результаты, представленные в первой главе, а также изложенные методики и особенности реализации расчётного алгоритма обсуждались в работах [1; 4; 5].

**Во второй главе** представлены результаты расчётов термодинамических зависимостей, полученных с помощью описанных в первой главе моделей.

В *первом разделе* второй главы представлены результаты расчётов изохорической  $C_V^{\text{el}}$  и изобарической  $C_P^{\text{el}}$  теплоёмкостей электронной подсистемы алюминия и молибдена. На рисунке 2 представлены результаты расчётов  $C_V^{\text{el}}$  на изохоре для алюминия в экспериментальном диапазоне температур вплоть до 15 эВ и для молибдена во всём расчётном диапазоне температур.

<sup>3</sup>Falkov, A. L. Ion-correlative model of dense mixture plasmas: Structural and thermodynamical properties / A. L. Falkov, A. A. Oveikin, 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 : IHT RAS, 2017. P. 282.

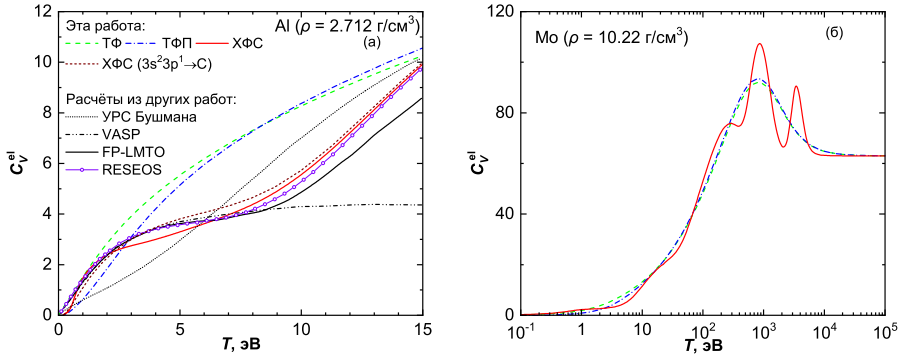


Рис. 2 — Изохорическая теплоёмкость электронов  $C_V^{\text{el}}$  (в атомной системе единиц на один атом) в зависимости от температуры  $T$  для (а) алюминия при постоянной плотности  $\rho = 2.712 \text{ г/см}^3$  и (б) молибдена при постоянной плотности  $\rho = 10.22 \text{ г/см}^3$ . Расчёты проведены по моделям ТФ, ТФП и ХФС. Также приведены результаты расчётов<sup>4</sup> других авторов полученные с помощью следующих методов: использование модели Либермана (код RESEOS); применение полноэлектронного (FP-LMTO) и псевдопотенциального (код VASP) подходов в рамках теории функционала плотности; выражение для теплового вклада электронов, используемое в полуэмпирическом уравнении состояния алюминия (УРС Бушмана).

Из анализ результатов расчётов получено, что 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 полноэлектронного расчёта<sup>4</sup> в рамках теории функционала плотности (FP-LMTO). А в случае, если расчёт по модели ХФС проводился с принудительным отнесением валентных электронов алюминия ( $3s^2 3p^1$ ) к непрерывному спектру (в регулярных расчётах эти состояния рассматривались квантово-механическим способом), то также наблюдается и количественное сходство этих моделей. Тем самым показано, что в рамках задачи расчёта теплоёмкостных характеристик электронной подсистемы металлов, квантово-механические модели среднего атома, такие как модель ХФС, могут служить альтернативой вычислительно более трудоемким методам теории функционала плотности. Кроме того, было получено характерное осцилляционное поведение для величин теплоёмкостей в зависимости от температуры (смотри, к примеру, значения  $C_V^{\text{el}}$  по модели ХФС на подрисунке 2(б)).

*Второй раздел* второй главы посвящён расчёту ударных адиабат сплошных и пористых образцов простых веществ и смесей.

<sup>4</sup> Sin'ko, G. V. Thermodynamic functions of the heated electron subsystem in the field of cold nuclei / G. V. Sin'ko, N. A. Smirnov, A. A. Ovechkin, P. R. Levashov, K. V. Khishchenko // High Energy Density Physics. 2013. Vol. 9, no. 2. P. 309–314.

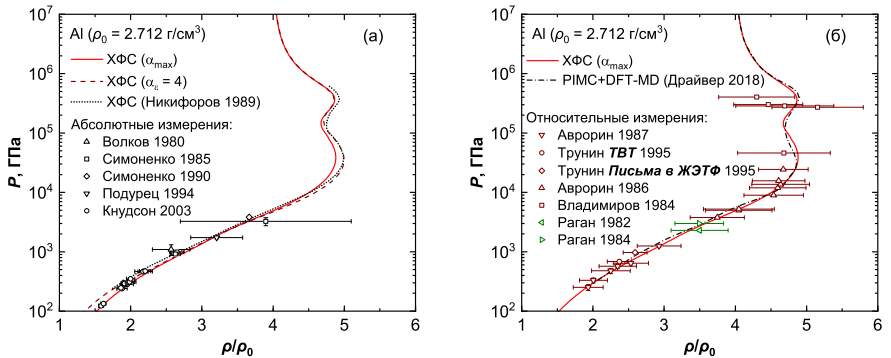


Рис. 3 — Ударная адиабата сплошных образцов алюминия ( $m_p = 1$ ,  $\rho_{00} = \rho_0 = 2.712 \text{ г/см}^3$ ), рассчитанная по модели ХФС для оптимального наибольшего значения  $\varepsilon_0$  ( $\alpha_{\max}$ ) и для фиксированного выбора номера корня уравнения (1) ( $\alpha_\epsilon = 4$ ). Ионный вклад получен в приближении ЗТС. Приведено сравнение с (а) аналогичными расчётами по модели ХФС других авторов<sup>5</sup> (Никифоров 1989) и (б) с результатом расчёта по модели PIMC+DFT-MD<sup>6</sup> (Драйвер 2018). Также приведено сравнение с экспериментальными данными по (а) абсолютным и (б) относительным измерениям ударной сжимаемости.

На примере ударной адиабаты алюминия исследовалось влияние способа выбора величины энергии эффективной границы непрерывного спектра  $\varepsilon_0$  на результаты расчётов по модели ХФС с учётом ионов по модели ЗТС. Приведено сравнение результатов, полученных с помощью описанного в первой главе алгоритма поиска номера корня уравнения (1), заключающегося в выборе оптимального наибольшего значения для  $\varepsilon_0$  (регулярные расчёты при  $\alpha = \alpha_{\max}$ ), с результатами по ранее предложенному<sup>5</sup> алгоритму, в котором фиксируется номер корня  $\alpha_\epsilon$  уравнения (1), так, чтобы значение  $\varepsilon_0$  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 3 представлены результаты расчётов ударной адиабаты сплошных образцов алюминия для перечисленных способов решения уравнения (1). В рамках этого исследования, во-первых, удалось с хорошей точностью повторить аналогичные расчёты других авторов (смотри подрисунок 3(а)), тем самым верифицировав реализованную расчётную программу. Во-вторых, отметить значимое изменение термодинамических зависимостей при учёте дополнительных состояний квантово-механическим способом. Тем не менее было показано, что в области максимального влияния этого эффекта на положение

<sup>5</sup> Никифоров, А. Ф. Расчёты уравнений состояния алюминия в области высоких температур на основе модифицированной модели Хартри-Фока-Слэтера : Препринт / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, С. К. Труханов, В. Б. Уваров ; Институт прикладной математики Академии наук СССР. М., 1989. № 137.

ударной адиабаты, нет достаточного количества надёжных эмпирических данных, которые позволили бы выбрать расчёт, лучше всего описывающий эксперименты. Но в тоже время, результаты расчётов по модели ХФС с  $\alpha = \alpha_{\max}$  наиболее близки к результатам первопринципных расчётов<sup>6</sup>, проведённых по комбинации квантового метода Монте-Карло с методом квантовой молекулярной динамики (кривая РМС+DFT-MD на подрисунке 3(б)).

Кроме ударной адиабаты сплошных образцов алюминия (со степенью пористости  $m_p = 1$ ), были проведены расчёты ударных адиабат пористых образцов алюминия ( $m_p = 3$ ), железа ( $m_p = 1$  и 1.8213), меди ( $m_p = 1, 3$  и 4) и молибдена ( $m_p = 1$  и 1.819). Для этих веществ по модели ХФС с учётом ионов по модели ЗТС были построены таблицы со значениями степеней сжатия в зависимости от давления на ударной адиабате (таблицы приведены в **приложении А**). С помощью этих зависимостей и доступных в литературе экспериментальных данных по абсолютным измерениям ударной сжимаемости были построены аппроксимации, рекомендованные к использованию в качестве ударно-волновых стандартов. В отличие от ранее предложенных аппроксимаций<sup>7</sup>, в новых зависимостях эффективно включён учёт оболочечных эффектов.

Помимо металлов, также были проведены расчёты ударных адиабат диоксида кремния в модификациях кварца ( $m_p = 1, 1.3384$  и 1.963) и стишовита. Результаты этих расчётов по модели ХФС с учётом ионного вклада по модели ИГ приведены в таблицах в **приложении Б**.

*В третьем разделе* второй главы представлены результаты расчётов изоэнтروпической разгрузки ударно-сжатых образцов алюминия и молибдена.

Для ударно-сжатых образцов молибдена результаты расчётов изоэнтроп разгрузки по модели ХФС с ионной частью по модели ЗТС представлены на рисунке 4(а). Значения начального давления  $P$  и массовой скорости  $U$  для изоэнтроп  $S_1^*$  и  $S_2^*$  выбраны согласно работам<sup>8,9</sup>. Кроме того, было проведено сравнение (смотри подрисунок 4(б)) полученных теоретических зависимостей с экспериментальными данными в координатах, непосредственно связанными с измеряемыми в этих экспериментах величинами, а именно с исходной скоростью ударной волны в молибдене ( $D_{Mo}$ ) и со скоростью образованной в барьере ударной волны ( $D_{\text{barrier}}$ ). Показано,

<sup>6</sup> 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.

<sup>7</sup> 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.

<sup>8</sup> 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.

<sup>9</sup> Ragan, C. E. Shock-wave experiments at threefold compression / C. E. Ragan // Physical Review A. 1984. Vol. 29, no. 3. P. 1391–1402.

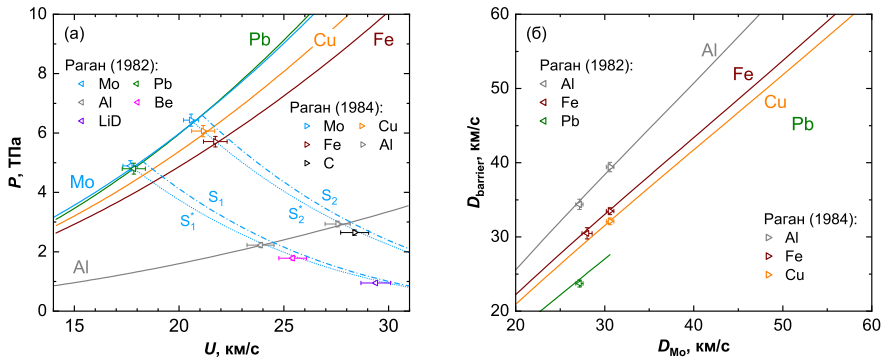


Рис. 4 — (а) Изоэнтропическая разгрузка молибдена в координатах давление  $P$  – массовая скорость  $U$ . Приведено сравнение главных ударных адиабаты различных материалов (сплошные кривые) и изоэнтроп разгрузки молибдена  $S_1^*$  (с начальным состоянием при  $P = 4.895$  ТПа,  $U = 17.67$  км/с) и  $S_2^*$  ( $P = 6.433$  ТПа,  $U = 20.57$  км/с) с экспериментальными данными (маркеры). Кроме того, приведены изоэнтропы разгрузки молибдена  $S_1$  и  $S_2$ , построенные из начальных состояний, соответствующие положениям на расчётной ударной адиабате молибдена при значениях волновых скоростей  $D_{Mo} = 27.16$  км/с и  $D_{Mo} = 30.6$  км/с. (б) Зависимость скорости ударной волны, образующейся в барьере  $D_{barrier}$ , от скорости ударной волны в сжатом молибдене  $D_{Mo}$ . При волновых скоростях в молибдене  $D_{Mo} > 30$  км/с динамический импеданс свинца становится больше динамического импеданса молибдена. Все расчёты проведены по модели ХФС с учётом ионной подсистемы по модели ЗТС.

что расчёты по модели ХФС с ионным вкладом по модели ЗТС находятся в согласии с экспериментальными данными.

*Четвёртый раздел* второй главы посвящён интерпретации относительных измерений сжимаемости в сильных ударных волнах.

Эксперименты с относительными способами измерения ударно-волновых параметров представляют особый интерес, так как именно в рамках этих экспериментов были достигнуты максимальные давления в ударных волнах. Для их измерения используется метод отражения (также известен как метод сравнения динамических импедансов). В постановке этих экспериментов, ударная волна проходит через экран из материала с известными характеристиками (вещество-эталон) и затем достигает поверхности исследуемого образца. После этого, волна изоэнтропического расширения (если динамический импеданс  $\rho_{00}D$  исследуемого вещества меньше чем у эталона) или вторичная ударная волна (в обратном случае) отражается обратно в экран. Скорости ударных волн в эталоне ( $D_{std}$ ) и в исследуемом образце ( $D_{smp}$ ) могут быть измерены.

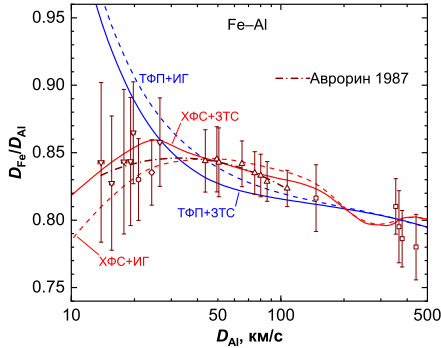


Рис. 5 — Относительное изменение скорости фронта ударной волны при прохождении границы раздела железо–алюминий. Расчёт кривых проведён по моделям ТФП и ХФС с ионными частями по моделям ИГ и ЗТС. Приведено сравнение с эмпирической аппроксимацией<sup>10</sup>  $D_{Al} = 0.614 + 1.1377D_{Fe} + 0.0008D_{Fe}^2$ . Обозначения экспериментальных данных по относительным измерениям ударной сжимаемости алюминия с использованием железного эталона аналогичны используемым на рисунке 3.

В диссертационной работе производится анализ результатов по относительным измерениям сжимаемости для следующих пар эталон–исследуемый образец: Fe–Al, Mo–Al, SiO<sub>2</sub>–Al, Al–Mo, Fe–Mo, Mo–Fe, Al–Cu и Pb–Cu. Для этого по моделям ТФП и ХФС с ионными частями по моделям ИГ и ЗТС для эталонных веществ были построены ударные адиабаты в широком диапазоне давлений. Затем для набора точек с выбранными волновыми скоростям  $D_{std}$  на полученных ударных адиабатах строились соответствующие кривые изоэнтроп разгрузки и ударных адиабат повторного сжатия. Определив координаты пересечения (в  $P$ – $U$  плоскости) полученных кривых с построенной по такой же модели ударной адиабатой исследуемого вещества, были получены зависимости вида  $D_{smp} = f(D_{std})$ , которые в дальнейшем сравнивались с имеющимися экспериментальными данными.

Детальное сравнение расчётной зависимости  $D_{Al} = f(D_{Fe})$  с экспериментальными данными по относительным измерениям сжимаемости сплошных образцов алюминия с использованием железа в качестве эталона представлено на рисунке 5. Показано, что комбинации моделей ХФС+ИГ и ХФС+ЗТС имеют лучшее согласие с экспериментальными данными<sup>10</sup> по сравнению с комбинациями ТФП+ИГ и ТФП+ЗТС в диапазоне волновых скоростей  $10 \lesssim D_{Fe} \lesssim 100$  км/с, что интерпретируется как косвенный признак наличия влияния оболочечных эффектов на термодинамические

<sup>10</sup> Аврорин, Е. Н. Экспериментальное изучение оболочечных эффектов на ударных адиабатах конденсированных веществ / Е. Н. Аврорин, Б. К. Водолага, Н. П. Волошин, Г. В. Коваленко, В. Ф. Куропатенко, В. А. Симоненко, Б. Т. Черноволук // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1987. Т. 93, № 2. С. 613–626.

свойства горячей плотной плазмы. Тем не менее, в области волновых скоростей  $100 \lesssim D_{\text{Fe}} \lesssim 1000$  км/с, где предсказанная амплитуда осцилляций вследствие оболочечных эффектов максимальна, и квазиклассический (ТФП), и квантово-механический (ХФС) расчёты не противоречат доступным экспериментальным данным.

Кроме того, была проведена интерпретация экспериментальных данных других авторов по относительным измерениям ударно-волновых параметров в алюминии, для чего использовались расчёты УРС по модели ХФС с ионным вкладом по модели ЗТС для эталонов из железа и молибдена. Значения измеренных в экспериментах волновых скоростей ( $D_{\text{std}}$  и  $D_{\text{smr}}$ ) и значения полученных при интерпретации этих экспериментов массовых скоростей в алюминии ( $U_{\text{Al}}^{\text{revis}}$ ) приведены в **приложении В**.

Результаты этой главы опубликованы в рецензируемых изданиях [2–6].

**В заключении** кратко излагаются основные полученные 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/см<sup>3</sup>) и молибдена (при  $\rho = 10.22$  г/см<sup>3</sup>).
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 энтропии 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, SiO<sub>2</sub>–Al (только с моделью 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.

## Наиболее значимые публикации автора по теме диссертации

1. *Kadatskiy, M. A.* Термодинамические свойства латуни при высоких температурах в рамках модели Хартри–Фока–Слэтера / М. А. Кадатский, 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 / М. А. Kadatskiy, К. 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 / М. А. Kadatskiy, К. 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 / М. А. Kadatskiy, К. 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 / М. А. Kadatskiy // High Energy Density Physics. — 2019. — Vol. 33. — P. 100700.
6. *Orlov, N. Y.* Application of quantum-statistical methods to studies of thermodynamic and radiative processes in hot dense plasmas / N. Y. Orlov, М. А. Kadatskiy, O. B. Denisov, К. V. Khishchenko // Matter and Radiation at Extremes. — 2019. — Vol. 4, no. 5. — P. 054403.

*Кадатский Максим Алексеевич*

Квантово-статистический расчёт термодинамических свойств простых веществ  
и смесей при высоких плотностях энергии

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать \_\_\_\_\_.\_\_\_\_.\_\_\_\_\_. Заказ № \_\_\_\_\_

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография \_\_\_\_\_