

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

**Динамическое сжатие изотопов водорода
при мегабарных давлениях**

Р.Ф. Трунин, В.Д. Урлин, А.Б. Медведев

Приведены результаты опытов по ударному сжатию твёрдого протия до давления 66 ГПа и жидкого и твёрдого дейтерия до давлений 110 и 123 ГПа соответственно, выполненных с применением взрывных устройств сферической геометрии. Результаты сравниваются с данными американских исследователей, полученными с использованием традиционных энергетических источников (взрывчатые вещества и легкогазовые пушки), новой установки с разгоном ударника сильным магнитным полем (Z-установка Национальной лаборатории Сандия) и мощных лазеров "Nova" (Ливерморская национальная лаборатория) и "Omega" (Лаборатория лазерной энергетики Рочестерского университета). Анализируются результаты измерений плотности изотопов водорода при их квазиизэнтропическом сжатии. Показано отсутствие аномального возрастания плотности при ударном и квазиизэнтропическом сжатии изотопов водорода. Вместе с тем для обоих процессов имеет место резкая смена наклонов кривых сжатия (соответственно при 45 и 300 ГПа).

PACS numbers: 07.35.+k, 62.50.-p, 64.30.-t

DOI: 10.3367/UFNr.0180.201006d.0605

Содержание

1. Введение (605).
2. Выбор и характеристика измерительных устройств для определения ударного сжатия (607).
 - 2.1. Полусферические измерительные устройства МЗ. 2.2. Специфика измерений на сферических взрывных устройствах.
3. Постановка измерений по определению ударного сжатия (609).
 - 3.1. Датчики и их расположение при регистрации ударных волн.
 - 3.2. Система конденсации и контроль температуры.
4. Результаты измерений (610).
5. О квазиизэнтропическом сжатии водорода (613).
6. Уравнения состояния протия и дейтерия (616).
 - 6.1. Уравнения состояния протия и дейтерия в твёрдом и жидком состояниях.
 - 6.2. Модифицированное уравнение состояния Ван-дер-Ваальса.
7. Заключение (620).
- Список литературы (621).

1. Введение

Интерес к исследованию различных, в том числе термодинамических, свойств водорода при высоких давлениях

Р.Ф. Трунин, В.Д. Урлин, А.Б. Медведев.

Российский федеральный ядерный центр "Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики", 607190 Саров, Нижегородская обл., Российская Федерация
Тел. (831-30) 2-01-27
E-mail: root@gdd.vniief.ru

Статья поступила 29 сентября 2009 г.,
после доработки 13 января 2010 г.

и температурах обусловлен его широким распространением в природе и применениями в различных технических высокоэнергетических устройствах. В частности, адекватные широкодиапазонные уравнения состояния (УРС) водорода необходимы при моделировании структуры и эволюции звёзд, планет-гигантов Солнечной системы, расчётах свойств сильно сжатой высокотемпературной плазмы в проблеме управляемого термоядерного синтеза и др. Однако, несмотря на сравнительную простоту водорода, до сих пор нет надёжных первопринципных расчётных моделей, адекватно отражающих его термодинамические свойства в конденсированном состоянии, что объясняется, прежде всего, трудностями однозначного учёта межчастичного взаимодействия, сложностью эффектов вырождения в сильнонеидеальной плазме, а также некоторыми другими факторами.

В связи с этим весьма актуальным является получение надёжных экспериментальных данных, служащих основой для разработки полумпирических широкодиапазонных уравнений состояния водорода и тестовым материалом для теоретических моделей.

В настоящей статье главное внимание уделено анализу прецизионных данных по ударному сжатию изотопов водорода при максимально доступных (на современных взрывных измерительных устройствах) параметрах. Рассмотрены также результаты исследования динамического сжатия водорода в условиях относительно плавного нарастания давления — так называемого квазиизэнтропического* сжатия, при котором разогрев существенно меньше, чем при ударном.

Кратко остановимся на хронологии экспериментальных исследований ударного сжатия. Первые измерения с жидким протием (H_2) были выполнены [1] в США в

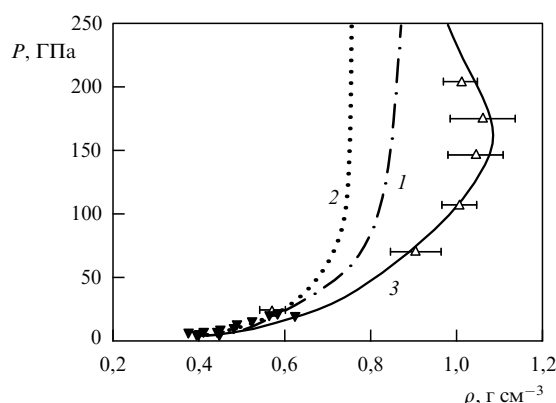


Рис. 1. Данные по ударному сжатию жидкого дейтерия (на 1988 г.). Результаты экспериментов [2–4] — ▼, [8, 9] — △ и расчётов [10, 11] — кривая 1, [12] — кривая 2, [8, 9] — кривая 3.

1966 г. Затем последовали публикации [2, 3] 1980 г. и 1983 г. Максимальные значения параметров, полученные в этих работах, соответствовали давлению $P \approx 10$ ГПа. В 1973 г. были опубликованы результаты исследований сжатия жидкого дейтерия (D_2) [4], позднее дополненные измерениями в [2, 3]. Максимальное давление в [2, 3] составило ≈ 23 ГПа. В качестве энергетических источников ударных волн в экспериментах применялись установки со взрывчатыми веществами (ВВ) и так называемые легкогазовые пушки.

Экспериментальные исследования ударного сжатия изотопов водорода в России в это время не проводились, поскольку считалось, что для определения параметров УРС водорода достаточно уже имевшихся экспериментальных данных, в том числе результатов работ по его квазиизэнтропическому сжатию [5–7].

В 1997–1998 гг. группа учёных из Ливерморской лаборатории США (LLNL) опубликовала [8, 9] результаты экспериментов по сжатию исходно жидкого дейтерия сильными ударными волнами, созданными излучением мощной лазерной установки "Nova". При давлениях, больших ≈ 50 ГПа, в дейтерии было обнаружено аномально высокое сжатие. Ряд экспериментальных точек по результатам исследований [8, 9] приведён на рис. 1. Там же представлены расчётные адиабаты жидкого дейтерия по УРС [10, 11] и уравнению [12] из библиотеки URC SESAME (США). Видно, прежде всего, большое несоответствие результатов расчётов и экспериментов [8, 9] в области давлений, превышающих 50 ГПа. При этом сами расчётные кривые заметно отличаются друг от друга. На рисунке 1 приведена также расчётная кривая из [8], построенная по модели УРС [13].

Данные "Nova" вследствие своей необычности вызвали немалые сомнения как у нас в стране, так и за рубежом. По предложению В.Е. Фортова, активно поддержанному Р.И. Ильяевым, было решено проверить результаты [8, 9] на генераторах ударных волн Российского ядерного центра "Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики"

(ВНИИЭФ). Наши исследования жидкого дейтерия при содействии В. Неллиса были поддержаны также руководством Ливерморской лаборатории.

Для оценки "масштаба бедствия", с которым пришлось иметь дело, рассмотрим характерные значения реализуемых в подобных опытах кинематических параметров — волновой D и массовой U скоростей. Из сопоставления в $D-U$ -координатах данных [8, 9] с результатами линейной экстраполяции в область мегабарных давлений ударной адиабаты жидкого дейтерия [2–4] следует, что при $D \approx 25$ км с⁻¹ ($P \approx 90$ ГПа) зависимости отстоят друг от друга на $\approx 8\%$ по массовым скоростям. Поэтому, для того чтобы показать справедливость того или иного результата, ошибка измерений скоростей должна быть заметно меньше 8% .

Для дополнительной уверенности в правильности результатов желательно было получить адиабаты не только исходно жидких, но и исходно твёрдых фаз протия и дейтерия. Совместное рассмотрение таких данных дало бы большие основания для ответа на вопрос о наличии аномальной сжимаемости при мегабарных давлениях.

Примерно в то же время проверку данных "Nova" начали (в экспериментах с исходно жидким дейтерием) американские исследователи из Лаборатории Сандиа (Sandia National Laboratories) [14, 15]. Для создания необходимых давлений они использовали установку, в которой с помощью сильного магнитного поля осуществляется разгон плоской металлической пластины до скоростей, обеспечивающих получение мегабарных давлений в дейтерии.

В разделе 4.1 будет показано, что результаты исследований, полученные в обеих лабораториях (ВНИИЭФ и Лаборатория Сандиа), согласуются между собой.

Недавно, после того, как данная статья была подготовлена к печати, стали известны результаты исследования ударного сжатия исходно жидкого дейтерия (D.G. Hicks и др. [16]) в диапазоне давлений $\approx 45-230$ ГПа. Давления в образцах создавались ударными волнами от мощного излучения лазерной установки "Omega". Определение параметров сжатия в [16] проводилось, так же как и во всех наших исследованиях, методом отражения [17]. Эти работы подтверждают отсутствие скачка плотности на ударной адиабате дейтерия, полученного при давлении ≈ 50 ГПа с использованием "Nova".

Первые результаты исследований квазиизэнтропической сжимаемости протия в широком диапазоне мегабарных давлений, выполненных во ВНИИЭФ, были опубликованы в 1972 г. [5]. В дальнейшем некоторые из этих результатов были уточнены [6, 7, 11]. Максимальное, реализованное в этих работах значение давления, непревзойдённое до сих пор, составило $\approx 1,3$ ТПа (1300 ГПа), плотность составляла ≈ 2 г см⁻³, получено сжатие примерно в 200 раз. В это же время об единичном измерении квазиизэнтропического сжатия водорода было сообщено в [18]. В последние годы появились новые работы этого направления [19–22], которые совместно с [5–7, 11] дали важный материал для проведения совокупного анализа экспериментальных данных.

Обсуждение результатов квазиизэнтропических опытов будет проведено в разделах 4, 5 после рассмотрения данных по ударному сжатию в разделах 2, 3. В разделе 6

* Сохраняем авторское, исторически сложившееся, написание слова "изэнтропа" и соответствующее написание производных от этого слова. Однако в *Физической энциклопедии* и *Большой советской энциклопедии* — "изотропа", согласно правилам словообразования в русском языке. (Примеч. ред.)

приводятся результаты описания экспериментальных данных двумя различными полуэмпирическими моделями уравнения состояния.

2. Выбор и характеристика измерительных устройств для определения ударного сжатия

2.1. Полусферические измерительные устройства МЗ

Для того чтобы обеспечить независимость проверки данных "Nova", желательно было провести её на устройствах, создающих ударные волны не лазерным способом, а, например, с помощью взрывчатых веществ. Из используемых во ВНИИЭФ подобных устройств, основанных на разгоне продуктами взрыва ударников, параметры состояний, близкие к реализованным на "Nova", обеспечивали сферические устройства, называемые "мягкими зарядами" (МЗ) [23].

Общая схема МЗ показана на рис. 2. Полусферический заряд ВВ инициируется одновременно по всей внешней поверхности полусферы с помощью специальной линзовой системы. Возникшие при этом продукты взрыва пересжатой детонационной волны, расширяясь при прохождении через небольшой воздушный промежуток, относительно плавно разгоняют оболочку-ударник, изготовленную из малоуглеродистой стали марки Ст-3 (поскольку эта сталь состоит в основном из чистого железа, а их плотности совпадают, мы не делаем разницы между этими материалами). По мере схождения к центру скорость оболочки непрерывно возрастает и на малых радиусах в некоторых устройствах МЗ достигает значения $\approx 23 \text{ км с}^{-1}$, которое

отвечает мегабарным давлениям в исходно конденсированном дейтерии.

При проведении опытов исследуемый образец располагается, в соответствии с требованиями метода отражения [17], за экраном из эталонного вещества. В качестве материала экрана в наших исследованиях использовался алюминий — единственный из металлов, ударная адиабата которого расположена сравнительно близко к ударным адиабатам изотопов водорода и УРС которого известно достаточно хорошо. Кроме того, что существенно, изэнтропы разгрузки Al, рассчитанные по ряду его современных полуэмпирических УРС, незначительно отличаются друг от друга, что позволяет провести определение массовых скоростей в дейтерии с приемлемой точностью. Другие, более "мягкие", вещества, в частности щелочные или щёлочноземельные металлы, ударные адиабаты которых расположены ближе по давлениям к ударным адиабатам дейтерия и протия, не могут быть использованы в качестве материала экранов, поскольку исследованы существенно менее подробно по сравнению с Al и, кроме того, вследствие своей высокой химической активности они являются малотехнологичными.

Были выбраны три конструкции зарядов МЗ (всего их разработано семь): МЗ-4, МЗ-8 и МЗ-18.

В зарядах МЗ-4 и МЗ-8 стальная полусферическая оболочка толщиной $\Delta_{\text{imp}} = 3,08 \text{ мм}$ исходно располагается на радиусе $R_{\text{imp}}^{\text{ext}} = 77 \text{ мм}$. В заряде МЗ-18 $\Delta_{\text{imp}} = 3 \text{ мм}$, $R_{\text{imp}}^{\text{ext}} = 130 \text{ мм}$.

В МЗ-4 внешний радиус экрана $R_{\text{scr}} = 35 \text{ мм}$, толщина двухслойного экрана $\Delta_{\text{scr}} = 4 \text{ мм}$ ($1 \text{ мм} + 3 \text{ мм}$), средний радиус измерения $R_m = (R_2 + R_1)/2 = 29 \text{ мм}$, база измерений (толщина образца) $S = R_2 - R_1 = 4 \text{ мм}$, здесь R_2 и

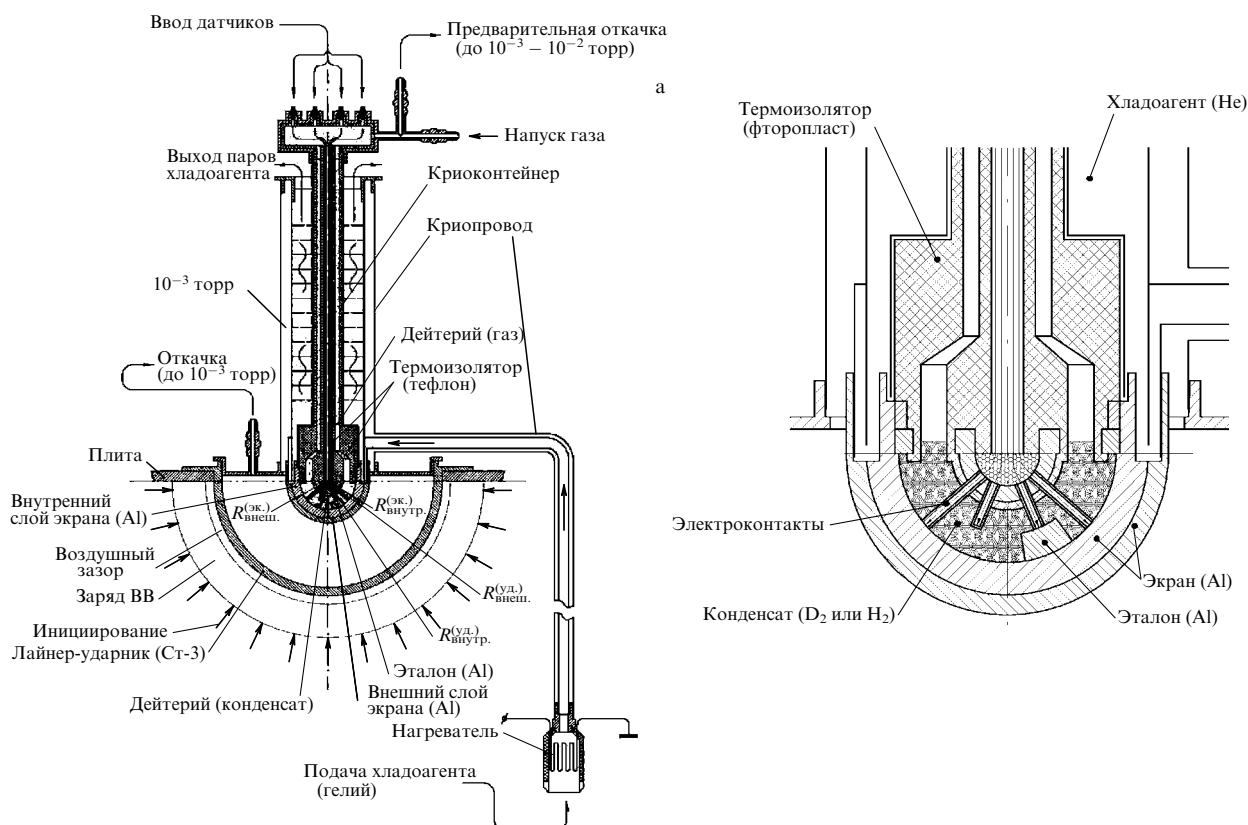


Рис. 2. Эскиз экспериментального устройства: (а) общий вид, (б) центральная часть.

R_1 — соответственно внешний и внутренний радиусы эталонного и исследуемого образцов, при этом R_2 совпадает с внутренним радиусом экрана.

В МЗ-8 $R_{scr} = 24,1$ мм, $\Delta_{scr} = 4,5$ мм (1,5 мм + 3 мм), $R_m = 17,6$ мм; $S = 4$ мм.

В МЗ-18 $R_{scr} = 23$ мм, $\Delta_{scr} = 6,5$ мм (2,5 мм + 4 мм), $R_m = 14,5$ мм, $S = 4$ мм. Радиус ВВ в последнем устройстве в 1,4 раза превосходит радиус ВВ в двух первых.

Оценки реализуемых параметров сжатия в жидком дейтерии показали, что на заряде МЗ-4 могут быть достигнуты давления ≈ 30 ГПа, которые близки к давлениям, полученным в опытах с исходно жидким дейтерием в [2–4]. Измерения проводились для подтверждения соответствия измерений, выполненных на зарядах МЗ, данным [2–4], в частности для доказательства правильности учёта (см. раздел 2.2) эффектов, связанных с нестационарностью сходящихся волн.

Оценочные значения давлений, реализуемых в дейтерии на зарядах МЗ-8 (≈ 60 ГПа) и МЗ-18 (≈ 100 ГПа), соответствовали характеристикам, достигнутому в экспериментах на "Nova".

Дейтерий и протий, находящиеся исходно в твёрдом состоянии, также исследовались с помощью измерительных устройств МЗ-4, МЗ-8 и МЗ-18.

Отметим преимущество систем МЗ перед лазерными установками: возможность исследования образцов со сравнительно большой толщиной (примерно в 20 раз большей, чем у образцов, использованных в [8, 9]). Это в определённой мере снимает возможное влияние неоднородности лазерного пучка на формирование волны на границе экран–исследуемый изотоп водорода, которое может сказываться на измерениях волновых характеристик при малой толщине образцов.

2.2. Специфика измерений на сферических взрывных устройствах

В рассматриваемых экспериментах основными регистрируемыми параметрами является время прохождения ударной волны по исследуемому и эталонным образцам. При известной толщине образцов (измерительной базе) экспериментальными параметрами становятся соответствующие скорости прохождения по образцам ударных волн.

Использование сферических систем для исследований сжатия связано с некоторыми специфическими особенностями. Отметим основные из них.

1. Отличие средней скорости $D_{av} = S/\Delta t$, получаемой из экспериментов, от локальной ("мгновенной") скорости ударной волны на том же измерительном радиусе R_m . Их разница $\Delta D_1 = D_{loc} - D_{av}$ находится из сопоставления средней и локальной скоростей на R_m по соответствующей расчётной (при решении в реальной геометрии газодинамической задачи на ЭВМ) зависимости прохождения волны. Полученная величина ΔD_1 , учитывающая расчётную разницу между D_{av} и D_{loc} , вносится затем в экспериментально определённое значение D_{av} . Для дейтерия ΔD_1 оказалась пренебрежимо малой по абсолютной величине. Для протия ΔD_1 была несколько большей, но и здесь она, как правило, не превышала нескольких десятых долей процента.

2. Несовпадение радиуса измерения волновых скоростей с радиусом границы алюминиевый экран–исследуемое вещество. Дело в том, что сопоставление параметров эталонного (А1) и исследуемого вещества (D_2 или

H_2) должно проводиться на границе их раздела ("на разрыве"), где выполняется условие равенства давлений и массовых скоростей в обоих веществах. Однако известными являются экспериментальные параметры проходящей волны в эталонном А1 и в D_2 (или H_2) на радиусе R_m , отличающемся от радиуса контактной границы на половину толщины образца $S/2$. Поэтому следующее уточнение связано с "переносом" действительной границы раздела водород–экран на радиус R_m . Соответствующая поправка ΔD_2 вводится в экспериментальную величину D_{av} из расчётного сопоставления скоростей в исследуемом веществе в действительной геометрии проведения опытов и изменённой, в которой граница водород–экран перемещена на радиус R_m . В данном случае поправка, абсолютная величина которой не превышает 1,5 %, положительна (она должна прибавляться к локальной скорости).

3. Наконец, укажем ещё на одну особенность измерений на системах МЗ. Асимметрия схождения ударных волн в исследуемом образце в зоне независимых регистраций опыта (таких зон в каждом опыте — три (см. раздел 3)) составляет около 50 нс при общей асимметрии в зоне измерений ≤ 100 нс. При экспериментально фиксируемых временных интервалах в 140–270 нс это с необходимостью требует для получения корректных результатов проведения серии из 3–5 опытов для нахождения каждой экспериментальной точки на ударной адиабате исследуемого вещества.

Остановимся также на важном вопросе, касающемся интерпретации экспериментальных данных. Речь идёт об использовании изэнтропы расширения А1, исходящей из состояний на ударной адиабате, реализуемых в А1 на радиусе R_m (каждому заряду МЗ отвечает своя подобная изэнтропа). Напомним, что искомые состояния в водороде определяются точкой пересечения этой изэнтропы с волновым лучом $\rho_0 D$ водорода. Изэнтропа А1 рассчитывается по его УРС. Вопрос заключается в том, какое из уравнений состояния алюминия (а их существует несколько) следует использовать для расчёта этих изэнтроп.

На рисунке 3 изображены изэнтропы, рассчитанные по пяти уравнениям состояния А1 [24–28], наиболее полно отвечающим совокупности экспериментальных данных. Все уравнения состояния примерно одинаково и вполне удовлетворительно описывают данные по

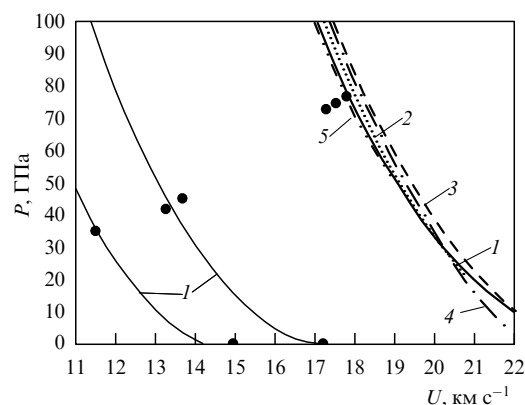


Рис. 3. Изэнтропы расширения алюминия: ● — экспериментальные данные [14, 29], расчётные изэнтропы на основе УРС [24] — 1, [25] — 2, [26] — 3, [27] — 4, [28] — 5.

ударному сжатию алюминия. Экспериментальных данных, за исключением ударно-волновых, для тестирования параметров УРС Al в интересующей нас области P – U -диаграммы очень мало. Известны три экспериментальные точки, полученные американскими исследователями при изэнтропическом расширении алюминия из исходных давлений 500, 300 и 240 ГПа [14] на ударной адиабате Al до сравнительно низких давлений, соответствующих ударной адиабате низкоплотного кремниевое аэрогеля (точки на рис. 3 при $P \approx 75, 42$ и 35 ГПа). Известны также параметры нескольких точек на изэнтропах Al при его расширении в воздух [29].

Сравнение модельных изэнтроп Al, рассчитанных по различным УРС, на рис. 3 проводится при одинаковом исходном давлении (≈ 500 ГПа) на ударной адиабате алюминия. При близком описании ударной адиабаты Al каждым из рассматриваемых УРС, имеется заметное различие в положении модельных изэнтроп.

Это различие является наибольшим при исходных состояниях на адиабате алюминия $P \approx 700$ ГПа, что примерно соответствует 110 ГПа в дейтерии. В этом случае максимальная разница в массовой скорости U составляет $\approx 3\%$ (для изэнтропы [27] и изэнтропы [28] U равна 17,7 и 18,3 км с⁻¹ соответственно).

Из рисунка 3 видно, что уравнение [24] несколько лучше, чем другие из сравниваемых уравнений состояния Al, соответствует экспериментальным данным опытов с аэрогелем. Поэтому при интерпретации опытов с водородом предпочтение было отдано этому уравнению [24]. При этом принималось также во внимание, что положение изэнтропы [24] практически совпадает с положением изэнтропы по уравнению состояния [28], которое использовалось при интерпретации аналогичных экспериментов в США.

Отметим, что и изэнтропа [25] близка к изэнтропе [24]. Например, при исходном давлении на ударной адиабате алюминия 720 ГПа (максимальное давление в Al при использовании устройства МЗ-18) при давлениях 65 и 115 ГПа (при которых соответственно зафиксированы максимальные параметры сжатия протия и дейтерия) отличие в положениях изэнтроп [24] и [25] составляет $\approx 1\%$ по скорости U .

Выбранное уравнение состояния Al [24] применялось как при определении параметров состояния в экране, так и в газодинамических расчётах течений материалов во всех измерительных устройствах. Параметры сжатия изотопов водорода, полученные с использованием других уравнений состояния Al, будут несколько отличаться от тех, что приведены в настоящей статье (в пределах 2–3 % по U), но это различие представляется не критичным для выводов относительно ударно-волнового сжатия исследуемых изотопов.

3. Постановка измерений по определению ударного сжатия

3.1. Датчики и их расположение при регистрации ударных волн

Использовались электроконтактные датчики, представляющие собой бифилярно свитую медную проволоку, покрытую изоляционным слоем лака (толщиной 10 мкм). Начальный виток проволоки и является рабочей точкой датчика. С целью строгой фиксации в пространстве

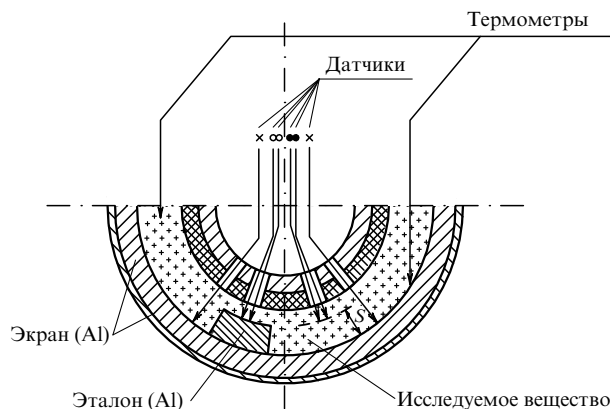


Рис. 4. Вертикальный разрез измерительной ячейки. На рисунке показана Al-пробка. Исследуемое вещество (D_2 или H_2) занимает всю остальную область, показанную крестовидной штриховкой. В этой области симметрично относительно Al-пробки расположены две исследуемые зоны-пробки, размещение измерительных датчиков на которых полностью повторяет размещение датчиков на Al-пробке. Местоположение электроконтактных датчиков и термометров показано стрелками. Стрелки с косыми крестиками указывают на датчики, установленные на внутренней поверхности экрана (по четыре датчика равномерно вокруг каждой пробки). Они фиксируют выход ударной волны из экрана в исследуемое вещество. Стрелки с полными кружками показывают положение датчиков, регистрирующих приход волны в конец зоны измерения (S) в Al, с темными кружками — положение датчиков, регистрирующих приход ударной волны в конец зоны измерения на дейтерии (протии).

датчик помещается в миниатюрную (диаметром $\leq 0,8$ мм) никелевую трубку. На датчик подаётся напряжение 300–500 В. Вторым электродом служит заземлённый корпус трубки. Ударная волна, подходя к датчику, разрушает его изоляционный слой, происходит электрический пробой, и на регистраторе фиксируется соответствующая временная метка. Простота и надёжность работы такого датчика, применяющегося в практике динамических измерений уже в течение нескольких десятилетий, явились основной причиной его выбора. Учитывалось также и то, что в ранее проведённых измерениях параметров ударных волн на выбранных зарядах (с другими веществами) применялись именно такие электроконтактные датчики.

В опытах использовалась так называемая пробочная схема (рис. 4), в которой над экраном симметрично относительно вертикали (указанной штрихпунктирной прямой на рис. 4) располагаются три исследуемых образца-пробки (на рис. 4 показан один из них — образец Al). Это традиционная схема расположения образцов в "полусферических" (и "плоских") опытах: по такой схеме проведено подавляющее большинство измерений [29]. Традиционная схема имеет ряд преимуществ перед другими способами расположения образцов (например, в форме сегмента или полной полусферы). В частности, во многих случаях параметры в экранах, особенно из лёгких веществ, в частности из Al, ранее определялись именно в "пробочном" варианте расположения образцов и контактов. Поэтому в целях сохранения преемственности (в отношении исходных состояний) было желательным, если не полное копирование измерительного узла (состав и исходная плотность ВВ, диаметры пробок, угол их расположения и т.п.), то, по

крайней мере, сохранение геометрии, близкой к ранее применяемой.

На заряде МЗ-18 состояния в алюминиевом экране прежде не определялись. Их предстояло найти. Было естественно совместить эти измерения с регистрацией скоростей непосредственно в дейтерии (водороде). Это можно было сделать только в пробочном варианте расположения образцов — в противном случае потребовалось бы проведение вдвое большего числа опытов.

Экспериментальные времена прохождения ударной волны по каждому образцу находились как разность Δt показаний датчиков, стоящих на образце (верхние контакты), и усреднённых показаний датчиков, стоящих на экране и расположенных вокруг образца (нижние контакты). Рабочие сигналы с датчиков записывались осциллографами HP54645D и TDS5254B.

Известно, что для получения на подобных системах надёжных параметров по ударному сжатию исследуемого вещества необходимо проведение нескольких опытов с последующим усреднением их результатов. Обычно для достижения корректных данных достаточно проведения 3–5 отдельных опытов. При этом под "корректностью результатов" понимается то, что такое число опытов (соответственно число пробок исследуемого вещества) приводит, как правило, к средней квадратичной ошибке среднего арифметического измерений, не превышающей 1–2 % от волновой скорости. В опытах, рассматриваемых в разделе 4, как и во всех предыдущих наших исследованиях, для любого из используемых зарядов мы придерживались этого критерия.

3.2. Система конденсации и контроль температуры

Во всех опытах по измерению ударного сжатия изотопов водорода успешно использовалось подробно описанное в [30, 31–35] специальное криогенное устройство для перевода дейтерия (протия) из газовой фазы в конденсированное состояние, разработанное Г.В. Борисковым и А.И. Быковым с сотрудниками [30]. Это устройство обеспечивает постепенное охлаждение измерительной ячейки, содержащей газ исследуемого изотопа, жидким гелием (и его парами) до температур, необходимых для конденсации газа. Соответствующий технологический процесс позволяет регулировать количество поступающего для охлаждения гелия и тем самым удерживать полученный конденсат в необходимых температурном и временном интервалах.

Таблица 1. Параметры ударного сжатия дейтерия*

Параметры в Al-этalone**		Устройство	ρ_0 , г см ⁻³	D , км с ⁻¹	U , км с ⁻¹	P , ГПа	ρ , г см ⁻³
D , км с ⁻¹	U , км с ⁻¹						
21,15	12,53	МЗ-18	0,171	28,87 ± 0,40	22,05 ± 0,30	109 ± 3	0,724 ± 0,060
21,15	12,53	МЗ-18	0,199	28,65 ± 0,40	21,59 ± 0,40	123 ± 2	0,808 ± 0,060
16,39	8,53	МЗ-8***	0,171	28,38 ± 0,30	15,38 ± 0,20	53,6 ± 1,0	0,697 ± 0,050
16,39	8,53	МЗ-8	0,199	20,51 ± 0,20	15,06 ± 0,15	61,5 ± 0,9	0,749 ± 0,030
13,29	5,99	МЗ-4	0,171	15,25 ± 0,30	10,95 ± 0,20	28,6 ± 0,8	0,606 ± 0,040
13,29	5,99	МЗ-4	0,199	15,34 ± 0,30	10,76 ± 0,20	32,8 ± 0,9	0,667 ± 0,050

* Волновые скорости в дейтерии и протии (соответственно табл. 1 и 2) приведены с учётом отличия средних (экспериментальных) волновых скоростей от "мгновенных" (на измерительном радиусе). Учтено также несовпадение радиусов измерений и радиусов границы Al–D₂ (или Al–H₂). Суммарная поправка ($\Delta D_1 + \Delta D_2$) составляет $\approx +50$ м с⁻¹ для МЗ-4, $\approx +70$ м с⁻¹ для МЗ-8 и $\approx +175$ м с⁻¹ для МЗ-18.

** Параметры исходных состояний в алюминиевом эталоне в табл. 1 и 2 относятся к адиабате исходно "холодного" Al (начальная температура $T_0 \approx 15$ К).

*** О параметрах, выделенных жирным шрифтом, впервые было сказано на 6-х Забайкальских научных чтениях [36] в 2001 г.

Как правило, при исследовании образцов водорода в жидком исходном состоянии температура измерительной камеры с газом после охлаждения камеры до нужного уровня (≈ 22 К) удерживалась постоянной в течение времени, необходимого для подготовки и подрыва измерительного заряда (примерно 20 мин).

При работе с исходно твёрдыми образцами осуществлялся двухстадийный температурный режим: сначала образец выдерживался в течение 5–10 мин в области устойчивого жидкого состояния, а затем охлаждался до температуры твёрдой фазы (5–10 К для протия и 5–15 К для дейтерия) и оставался при этих температурах до подрыва заряда.

Строгим соблюдением указанного температурного режима обеспечивалось получение требуемого в опытах жидкого или твёрдого исходного состояния исследуемого изотопа.

Контроль за температурой охлаждаемого образца осуществлялся с помощью миниатюрных (характерный размер около 1 мм) полупроводниковых термометров сопротивления, которые обеспечивали определение температур вблизи нужных значений с погрешностью, не превышающей 2 % от измеряемого значения.

4. Результаты измерений

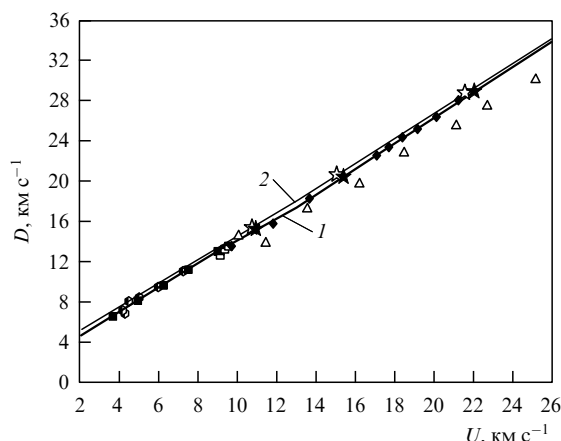
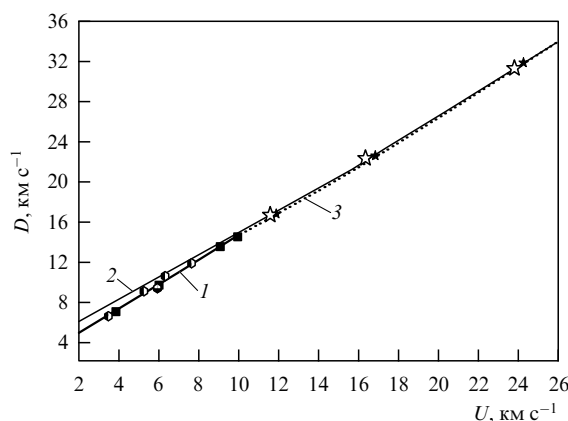
Полученные параметры ударного сжатия дейтерия и протия приведены в табл. 1 и 2.

Обсуждение экспериментальных результатов по ударному сжатию. Из трёх типов исходных состояний исследуемых образцов (твёрдый H₂, жидкий D₂ и твёрдый D₂) наиболее полно изучен жидкий дейтерий. Для него получены данные в плосковолновых экспериментах [2–4] (с применением ВВ и газовых пушек), на сферических системах с разгоном ударников-лайнров сходящимися продуктами взрыва [31–33, 35], а также на новых системах с применением лазерных [8, 9, 16] и электродинамических [14, 15] устройств. Результаты опытов с исходно жидким и твёрдым дейтерием в $D-U$ -координатах показаны на рис. 5. Прежде всего отметим вполне удовлетворительное совпадение наших данных для жидкого дейтерия с результатами Лаборатории Сандия [14, 15] практически во всём общем диапазоне регистрируемых скоростей. Неплохое совпадение имеется и для параметров самой "низкой" экспериментальной точки, полученной на устройстве МЗ-4, с данными [2–4] в области сравнительно небольших давлений. Как уже

Таблица 2. Параметры ударного сжатия противя*

Параметры в Al-эталоне		Устройство	ρ_0 , г см ⁻³	D , км с ⁻¹	U , км с ⁻¹	P , ГПа	ρ , г см ⁻³
D , км с ⁻¹	U , км с ⁻¹						
21,15	12,53	МЗ-18	0,088	$31,30 \pm 0,30$	$23,82 \pm 0,30$	$65,6 \pm 1,0$	$0,368 \pm 0,030$
16,39	8,53	МЗ-8	0,088	$22,20 \pm 0,50$	$16,43 \pm 0,30$	$32,1 \pm 0,9$	$0,339 \pm 0,030$
13,29	5,99	МЗ-4	0,088	$16,67 \pm 0,30$	$11,59 \pm 0,20$	$17,0 \pm 0,3$	$0,289 \pm 0,020$

* См. примечания к табл. 1.

Рис. 5. Данные по ударному сжатию исходно жидкого и твердого дейтерия в $D-U$ -координатах. Эксперимент для жидкого D_2 : $\circ$ — [2], $\bullet$ — [3], $\square$ — [4], $\triangle$ — [8, 9], $\diamond$ — [14, 15], $\star$ — [35]. Эксперимент для твердого D_2 [35] — $\star$. Аппроксимация экспериментальных данных для D_2 : кривые 1 и 2 соответствуют жидкому и твердому начальным состояниям.Рис. 6. Данные по ударному сжатию противя в $D-U$ -координатах. Эксперимент для жидкого H_2 : $\circ$ — [1], $\bullet$ — [2], $\square$ — [3]. Эксперимент для твердого H_2 [34] — $\star$. Аппроксимация экспериментальных данных для H_2 : 1 и 2 — жидкое и твердое начальные состояния, $\star$ — точки для жидкого противя, рассчитанные по экспериментальным результатам для твердого противя; 3 — аппроксимация расчетных данных для жидкого противя.

упоминалось, целью измерений на этом заряде было подтверждение правильности измерений сжатия малоплотных конденсированных веществ, какими являются конденсированные изотопы водорода, на полусферических и плоских измерительных устройствах путём их взаимного сопоставления. Совпадение экспериментальной точки по жидкому дейтерию с данными американских исследователей, полученными в плоской геометрии, снимает этот вопрос.

Экспериментальные точки для жидкого D_2 , полученные на установке "Nova", начиная с $D \geq 17$ км с⁻¹, не совпадают с полученной во ВНИИЭФ и в Лаборатории Сандиа новой $D-U$ -зависимостью (кривая 1 на рис. 5). Сильно различаются и наклоны адиабат. В практике динамических измерений не было случая, когда для одного исследуемого вещества так сильно бы различались экспериментальные данные. Отметим, что никакими разумными (т.е. в пределах погрешности измерений) вариациями параметров во взрывных опытах представленные в настоящей статье результаты нельзя свести воедино с результатами "Nova".

Полученные две ударные адиабаты дейтерия в жидком и твердом исходном состояниях (см. рис. 5) и адиабата исходно твердого противя (рис. 6) разумно соответствуют друг другу. В переменных $D-U$ данные для исходно твердого H_2 ($\rho_0 = 0,88$ г см⁻³), твердого ($\rho_0 = 0,199$ г см⁻³) и жидкого ($\rho_0 = 0,171$ г см⁻³) D_2 можно аппроксимировать примерно параллельными и близкими друг другу кривыми, которые при этом качественно характеризуются одинаковыми особенностями.

Рассмотрим их на примере жидкого дейтерия. Адиабата дейтерия может быть аппроксимирована в первом приближении тремя отрезками прямых

$$D = C_0 + sU.$$

Первый участок (до $U \leq 9$ км с⁻¹) соответствует данным [2, 4], и ему отвечают $C_0 = 2,2$ км с⁻¹, $s = 1,20$. На втором участке ($9 \text{ км с}^{-1} \leq U \leq 13 \text{ км с}^{-1}$) $C_0 = 3,2$ км с⁻¹, $s = 1,09$. На третьем участке ($13 \text{ км с}^{-1} \leq U \leq 30 \text{ км с}^{-1}$) $C_0 = 0,8$ км с⁻¹, $s = 1,27$.

Уже само по себе представление зависимости $D(U)$ в виде ломаной, состоящей из трёх прямолинейных отрезков с разным наклоном, является необычным, достаточно редко встречающимся в практике исследований ударных адиабат. Возможны, конечно, и другие представления, например кубическое описание второго участка по типу [33] при параболическом описании первого участка и т.п., но качественно это не меняет сути дела (мы предпочтём простейшее описание). Представление адиабаты в виде трёх отрезков с резко изменяющимися наклонами должно иметь какие-то физические причины. В данном случае наиболее вероятной причиной этого является диссоциация молекул водорода, т.е. его переход в атомарное состояние.

Для анализа (основанного на соотношениях для идеального газа), являющегося продолжением анализа, начатого в работе [33], рассмотрим наклоны адиабат на втором и третьем участках. Из рисунка 5 видно, что наклон s адиабаты жидкого дейтерия при переходе от второго участка к третьему заметно увеличивается

(примерно на 14%). Обратимся к анализу изменения величины эффективного коэффициента Грюнайзена Γ на выделенных участках адиабат жидкого дейтерия и его связи с процессом диссоциации, происходящим при сжатии дейтерия. По определению коэффициент Γ — это отношение теплового давления к плотности тепловой энергии: $\Gamma = (1/\rho)(\partial P/\partial E)_\rho$. С возрастанием амплитуды ударной волны температура сжатого вещества увеличивается, происходит перераспределение тепловой энергии между частицами с различными степенями свободы. Для одноатомных газов только с поступательными степенями свободы $\Gamma = 2/3$. Для газа, представляющего собой смесь двухатомных молекул и образовавшихся в результате их диссоциации атомов, с учётом вращательных и колебательной степеней свободы молекулы можно получить [37] $\Gamma = 2(1 + \beta)/(7 - \beta)$, где β — степень диссоциации молекул. В области предельных режимов сжатия $\Gamma = 2/(\sigma_{\text{lim}} - 1)$ (для линейной $D(U)$ -зависимости), $\sigma_{\text{lim}} = s/(s - 1)$. В этом случае $\Gamma = 2(s - 1)$ и, учитывая связь Γ и β , получаем $s = 8/(7 - \beta)$. В отсутствие диссоциации $\beta = 0$, $\Gamma = 2/7$, $\sigma_{\text{lim}} = 8$, $s = 1,14$. При завершённой диссоциации $\beta = 1$, $\Gamma = 2/3$, $\sigma_{\text{lim}} = 4$, $s = 1,33$.

Эксперимент показывает, что в третьей области ($40 \text{ ГПа} \leq P \leq 100 \text{ ГПа}$) $s \approx 1,27$, чему соответствуют $\sigma_{\text{lim}} \approx 4,7$, $\Gamma \approx 0,54$, $\beta \approx 0,7$. В этой области большинство молекул, видимо, диссоциировано. Значению $s \approx 1,20$ в первой области ($P \leq 20 \text{ ГПа}$) соответствует $\beta \approx 0,3$, т.е. в этой области диссоциировано относительно небольшое количество молекул. Сравнение полученных оценок для β первого и третьего участков адиабаты показывает, что, вероятно, на втором её участке ($20 \text{ ГПа} \leq P \leq 40 \text{ ГПа}$) происходит интенсивный процесс тепловой диссоциации D_2 . Этот приближённый анализ подтверждают также результаты модельных расчётов [11, 38], согласно которым процесс диссоциации за фронтом ударной волны начинается при $P \geq 20 \text{ ГПа}$ и температуре около 5000 К (это совпадает с нижней границей второго участка) и заканчивается в основном при давлениях $40 - 50 \text{ ГПа}$ и температуре $\approx 15000 \text{ К}$. Примерно этим давлением отвечает начало третьего участка $D(U)$ -соотношения ($U \approx 15 \text{ км с}^{-1}$, $D \approx 20 \text{ км с}^{-1}$, $P \approx 50 \text{ ГПа}$). Приведённые оценки не противоречат также данным работ [15, 38–41]. Ударные адиабаты твёрдого протия (см. рис. 6) и твёрдого дейтерия (см. рис. 5), так же как и адиабата жидкого дейтерия, могут быть представлены в $D-U$ -координатах прямолинейными отрезками. Причём все адиабаты имеют почти одинаковый наклон (разница в наклонах, по существу, находится в пределах ошибок измерений). Отсюда следует, что приведённые выше оценки коэффициента Грюнайзена и степени диссоциации справедливы для всех трёх адиабат.

Рассмотрим экспериментальные данные в $P-\rho$ -координатах. Уже говорилось о том, что для получения надёжных данных о сжатии вещества на каждом сферическом измерительном устройстве МЗ необходимо проведение серии из 3–5 отдельных опытов с последующим усреднением результатов. Это иллюстрирует рис. 7, на котором, наряду со средними значениями (звёзды), показаны экспериментальные точки отдельных опытов (кружки и квадраты) с твёрдым дейтерием на устройствах МЗ-8 и МЗ-18. Параметры каждой из двух групп точек получены при разных, но фиксированных исходных состояниях в алюминиевом экране. Видна существенная

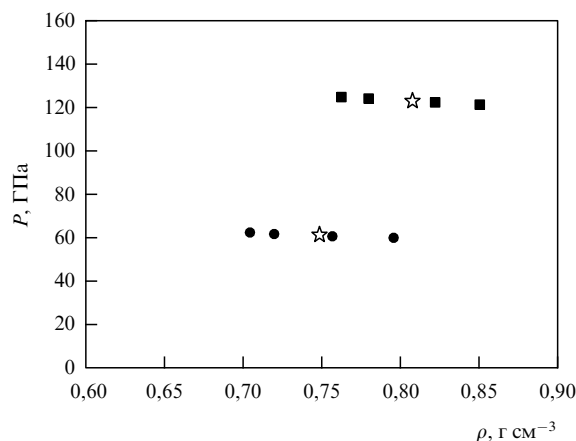


Рис. 7. Результаты отдельных ударно-волновых опытов с твёрдым дейтерием в $P-\rho$ -координатах: ■ — устройство МЗ-18, ● — устройство МЗ-8, ☆ — средние результаты статистической обработки.

разница в положении точек по отдельным опытам (она ещё более возрастёт при учёте погрешностей в экране). Поэтому, ограничиваясь при исследовании ударного сжатия единичными измерениями (опытами), можно получить совершенно нереальную картину сжатия вещества.

Все результаты по дейтерию сопоставлены на рис. 8. Здесь особенно наглядно проявляется противоречие данных, полученных на "Nova", с настоящими результатами и с измерениями Лаборатории Сандия. Высказывалось предположение [42], что возможной причиной резкого увеличения плотности в исследованиях [8, 9] могло быть нестрогое соблюдение геометрии между направлением распространения ударной волны, созданной лазерным пучком, и перпендикулярным ему направлением рентгенографической регистрации волновых параметров в дейтерии. Это могло привести к завышению массовой скорости и, как следствие, к увеличению сжатия. Как видно из рис. 8 (см. также [33]), взаимные погрешности аппроксимирующих кривых, обусловленные совокупной погрешностью всех наших эксперимен-

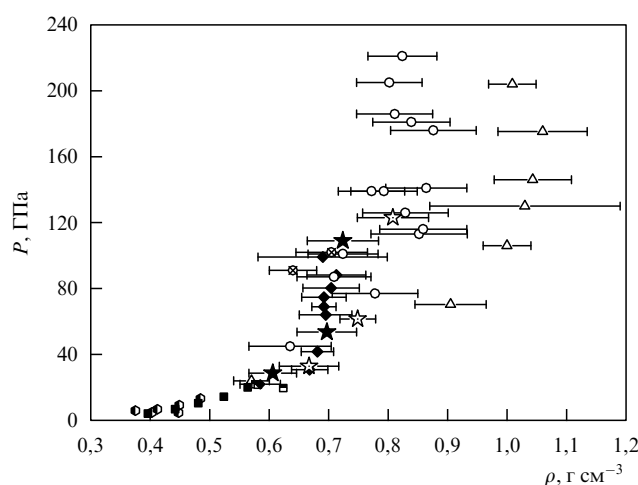


Рис. 8. Данные по ударному сжатию дейтерия в $P-\rho$ -координатах. Обозначения аналогичны обозначениям на рис. 5, за исключением: ○ — [16], ⊗ — [43].

тальных точек и данных [15], не имеют общего перекрытия с данными "Nova" (с учётом их собственных погрешностей). Вместе с тем их взаимное совпадение вполне удовлетворительное. Подчеркнём также согласованность между собой результатов по определению ударного сжатия двух фаз изотопов водорода, полученных по методике, многократно проверенной на нескольких сотнях независимых экспериментов, включая опыты на газовых пушках и системах с ВВ. Всё это является убедительным доказательством ошибочности результатов работ [8, 9].

На рисунке 8 приведены также недавно опубликованные данные по ударному сжатию исходно жидкого дейтерия до давлений в 230 ГПа [16], полученные с использованием лазерной установки "Omega". Несмотря на достаточно большой экспериментальный "разброс" в положении отдельных экспериментальных точек (единичные опыты), в целом новые данные соответствуют результатам [14, 15, 33, 35] (в диапазоне общих исследованных давлений $P \leq 100$ ГПа) и также противостоят результатам, полученным на "Nova" [8, 9]. При давлениях, превышающих 110 ГПа, данные [16] отклоняются от своего плавного продолжения в сторону больших плотностей. Их положение соответствует значению предельного сжатия около 5.

Здесь же представлены две экспериментальные точки дейтерия из работы [43], которые получены на взрывном устройстве МЗ-18, но с изменённой по сравнению с описанной здесь конструкцией измерительной ячейки. В опытах использовался газообразный дейтерий, сжатый начальным давлением 150 и 200 МПа (плотности 0,133 и 0,153 г см⁻³). Для удержания газа в ампуле при таких высоких исходных давлениях пришлось использовать в качестве силовой оболочки экрана прочную легированную сталь ХН35ВТЮ, "высланную" по внутренней поверхности полости алюминием. Проведено по одному опыту с дейтерием при указанных значениях исходной плотности. Как отмечалось выше, для получения представленных данных на полусферических измерительных системах одного опыта явно недостаточно. Поэтому достоверность полученной информации в этих опытах невелика. Об этом свидетельствует и само положение экспериментальных точек (см. рис. 8): например, параметры сжатия дейтерия с $\rho_0 = 0,153$ г см⁻³ совпадают при тех же давлениях с параметрами конденсированного дейтерия ($\rho_0 = 0,171$ г см⁻³).

Безусловно, иметь данные о сжатии дейтерия с пониженной плотностью при мегабарных давлениях полезно. И можно надеяться, что авторы [43] найдут возможность провести необходимое количество полноценных опытов для этой цели.

Результаты опытов по ударному сжатию исходно твёрдого протия в P – ρ -координатах приведены на рис. 9, где они сопоставлены с данными [1–3], относящимися к жидкому исходному состоянию и существенно меньшим давлениям. Стрелками показано оценочное положение экспериментальных точек протия, пересчитанных на исходную плотность $\rho_0 = 0,071$ г см⁻³ (плотность исходно жидкого протия).

Для протия такой пересчёт проведён при небольшой линейной экстраполяции прямых $D(\rho)$ до плотности его жидкого состояния $\rho_0 = 0,071$ г см⁻³. В целом получено неплохое соответствие российских и американских данных, относящихся к жидкому протию. Отметим,

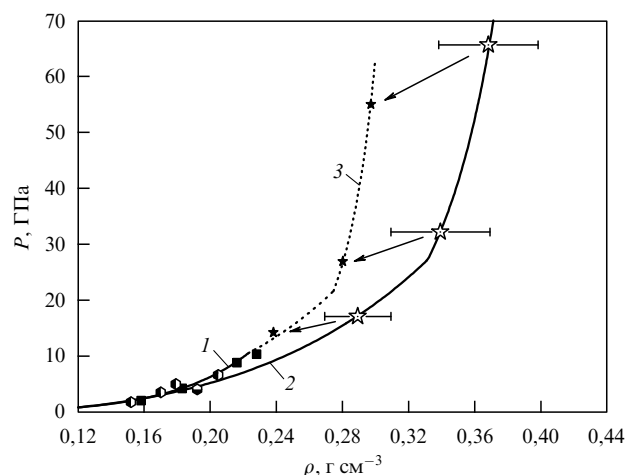


Рис. 9. Данные по ударному сжатию протия в P – ρ -координатах. Обозначения те же, что и на рис. 6.

что ударное сжатие протия в исходно твёрдом состоянии ранее никем не исследовалось.

5. О квазиизэнтропическом сжатии водорода

К настоящему времени опубликованы результаты экспериментов по измерению квазиизэнтропического сжатия протия и дейтерия в динамических условиях, полученные тремя группами исследователей из ВНИИЭФ — [5–7, 11], [19–21] и [22]. Имеется также публикация американских учёных из LLNL [18]. Заметим, однако, что работа [18] носила методический характер, а приводимые в ней оценки сжатия водорода рассматривались как предварительные (так, расчётные значения давлений в водороде вблизи области регистрации плотности могли изменяться от 100 до 300 ГПа). К сожалению, окончательные результаты авторами [18] не опубликованы.

В [5–7] исследовался протий, находящийся в газообразном состоянии при исходной температуре 323 К. Начальные значения давления, плотности и энтропии (отнесённые к газовой постоянной R) приведены в табл. 3. В опытах использовалась измерительная конструкция со сферической геометрией (рис. 10), содержащая слой ВВ, одновременно инициируемый по внешней поверхности, стальную оболочку, примыкающую вплотную к ВВ, и контрастирующую оболочку из тяжёлого металла, внутренняя полость которой заполнена исследуемым протием. После подрыва заряда продукты взрыва разгоняют оболочку, которая при своём движении к центру тормозится газом. Траектория движения оболочки, вплоть до момента её остановки (этот момент соответствует максимальному сжатию газа) и начала обратного движения от центра, фиксируется в серии опытов просвечивающим излучением мощной рентгенографической установки на фотоплёнках, сохраняемых в защитной обложке. Средняя плотность сжатого водорода определяется диаметром внутренней полости на фиксируемый момент и первоначальной массой газа. Непосредственным результатом опытов является набор зависимостей радиуса внутренней оболочки R от времени t . Каждая из зависимостей $R(t)$ соответствует определённому начальному размеру сжимающей газ оболочки и начальному давлению (плотности) газа в полости. В

Таблица 3. Параметры квазиизэнтропического состояния

Начальные значения параметров при $T = 323$ К			Значения параметров в момент остановки оболочки			
P_0 , МПа	ρ_0 , г см $^{-3}$	S/R	$r_{\min}$, мм	ρ , г см $^{-3}$	P , ГПа	T , К
75	0,0390	9,4	29,0–30,4	0,42–0,48	38	1800
160	0,0635	8,6	22,8–23,6	0,64–0,70	110	2000
100	0,0470	9,1	19,1–20,3	0,90–1,06	320	2800
75	0,0390	9,4	17,0–18,0	1,04–1,26	340	3300
50	0,0292	9,8	14,5–15,5	1,26–1,54	490	3700
25	0,0164	10,5	11,2–12,0	1,54–1,90	870	5200
15	0,0104	11,0	9,1–10,1	1,70–2,30	1300	7000

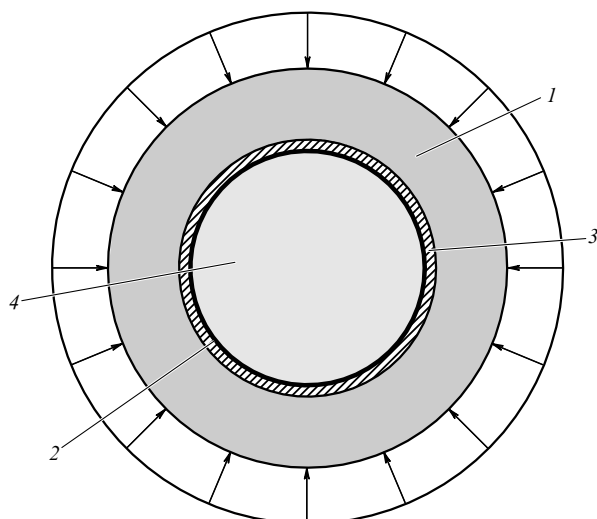


Рис. 10. Схема опытов по исследованию квазиизэнтропического сжатия водорода с использованием сферических устройств: 1 — взрывчатое вещество, 2 — контрастирующая фольга, 3 — стальная оболочка-ударник, 4 — исследуемый газ.

работах [5–7] приводятся, наряду с экспериментальными значениями максимальной (фактически усреднённой) плотности водорода ρ , расчётные значения среднего давления P , отвечающие данной плотности ρ . Значения давления определяются из расчётов волновых газодинамических процессов в экспериментальном устройстве. Для нахождения давления привлекается процедура усреднения по слою, содержащему около 80 % массы сжатого газа (непостоянство распределения давления в газе достигает одного-двух десятков процентов). При расчётах давления используются уравнения состояния всех веществ, входящих в измерительную конструкцию, в том числе и УРС самого протия. Параметры последнего варьируются так, чтобы обеспечить воспроизведение всех полученных экспериментальных зависимостей $R(t)$ (при определении модельного УРС привлекаются также данные других независимых опытов, в том числе характеризующих свойства водорода в статических условиях нагружения). Отметим, что в сравнительных опытах, выполненных с водородом и дейтерием, было показано, что оба изотопа сжимаются одинаково.

Важным обстоятельством является выяснение влияния выбранных уравнений состояния веществ и расчётных схем на адекватность описания газодинамического движения оболочки в отсутствие газа в полости (т.е. динамики поршня, сжимающего газ). В специальной серии опытов показано совпадение расчётных и экспериментальных параметров на этапе схождения оболочки

без газа и тем самым показана возможность исследования УРС изотопов водорода в выбранной схеме проведения опытов.

В последующих публикациях авторов [6, 7, 11] первоначальные, опубликованные в [5], значения давлений были несколько скорректированы (отчасти из-за уточнений УРС протия). Было также исправлено одно значение средней плотности ρ (при $P \approx 800$ ГПа), которое в [5] было указано ошибочно. В окончательной обработке данные приводятся в [11] (см. табл. 3, в которой наряду с экспериментальными значениями ρ протия, приведены расчётные значения средних P и T).

Отметим, что процесс сжатия водорода в опытах [5] (и подобных им) носит сложный волновой характер. Сначала осуществляется сжатие газа ударной волной с амплитудой $\approx 1,5$ –3 ГПа (последующие волны характеризуются существенно меньшими амплитудами). "Дожатие" газа до фактически усреднённой плотности осуществляется суперпозицией волн, отражённых от центра и от движущейся к центру оболочки. Газ при таком сравнительно медленном сжатии нагревается существенно меньше, чем при сжатии сильной ударной волной с тем же конечным давлением. Этим и обеспечивается квазиизэнтропичность процесса. Расчётная [11] температура протия в данных экспериментах по оценке составляет ≈ 1800 –7000 К (наименьшие значения T отвечают $P \approx 38$ ГПа, наибольшие — $P \approx 1300$ ГПа).

В работах [19–21] использовалась взрывная цилиндрическая конструкция, в которой стальная оболочка внутреннего каскада сжимала газообразный дейтерий через смягчающую прокладку из этого же газа. Схема опытов приведена на рис. 11. Начальная плотность дейтерия составляла $\approx 0,04$ г см $^{-3}$. Так же как и в [5], итоговым результатом в [19–21] является ряд экспериментальных значений средней плотности ρ и расчётных значений среднего давления P на момент остановки оболочки второго каскада (при расчётах P использовалось УРС [10] с параметрами, подобранными так, чтобы результаты расчётов с ними соответствовали результатам опыта [5]). При сопоставлении данных по квазиизэнтропическому сжатию протия [5–7, 11] и дейтерия в [19–21] считалось, что отношение их плотностей на изобарах равно двум. Оценка конечной температуры дейтерия (несколько тысяч градусов Кельвина) имеет тот же порядок величины, что и в [11].

Получение изображений сжатого газа в обоих типах устройств основано на использовании рентгенографической техники регистраций. К сожалению, качество снимков снижается по мере увеличения давления. Наиболее заметно это проявляется начиная с давлений 100 – 150 ГПа. По нашим оценкам, точность регистрации

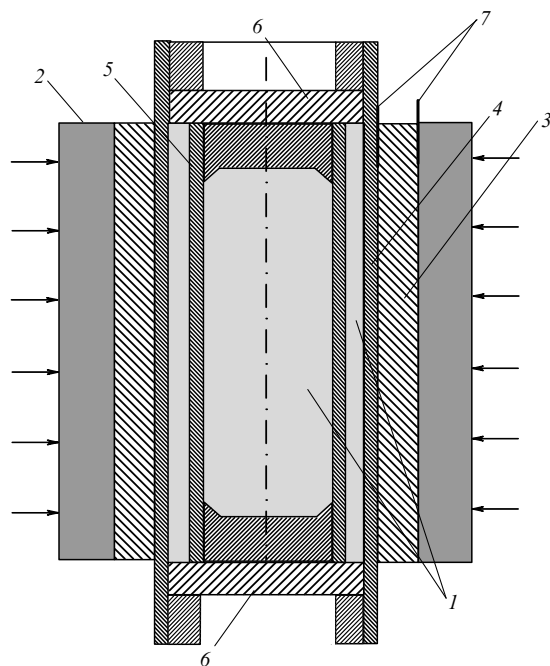


Рис. 11. Цилиндрическая геометрия опытов: 1 — газ, 2 — взрывчатое вещество, 3 — прокладка из оргстекла, 4, 5 — стальные оболочки, 6 — заглушки, 7 — электроконтактные датчики.

плотности в этих условиях не лучше $\approx 15\text{--}20\%$. Примерно такие же величины (20%) характеризуют и расчётные значения давлений (в основном из-за непостоянства давления на время остановки оболочки). Причина больших погрешностей в плотности, по-видимому, заключается в неустойчивости полёта оболочки, в частности её расслоении при указанных выше давлениях ($\geq 100\text{--}150$ ГПа). Во всяком случае, на ряде снимков при высоких давлениях расслоение оболочки хорошо видно. Это и приводит к потере точности определения радиуса её остановки, т.е. плотности исследуемого газа.

В работе [22] опубликованы данные по определению квазиизэнтропического сжатия исходно твёрдых дейтерия и протия (с начальной температурой ≈ 5 К) металлической оболочкой, разгоняемой сильным магнитным полем, создаваемым генератором МК-1 [44]. Использовалась цилиндрическая система обжатия, в которой магнитное поле передаёт свою энергию медной оболочке, сжимающей исследуемое вещество. При определении радиуса R полости применялся (так же как и в [5–7, 11, 19–21]) рентгенографический способ регистраций. Средняя плотность водорода ρ определялась по значению радиуса R , зафиксированному на момент рентгенографирования. В опытах [22] средняя величина давления P , соответствующая экспериментальному ρ , находилась не расчётным путём, как в [5–7, 11, 19–21], а по экспериментально измеряемому среднему сжатию алюминиевого образца-эталоны, расположенного над исследуемым изотопом водорода. Различие средних давлений в водороде и алюминии учитывалось посредством расчёта. Таким образом, в [22] определяются два параметра состояния исследуемого вещества — средние ρ и P . Данные значения, в отличие от соответствующих значений в [5–7, 11, 19–21], не обязательно отвечают максимальному сжатию газа оболочкой (рентгенографирование в [22] производится в моменты, в которые различие

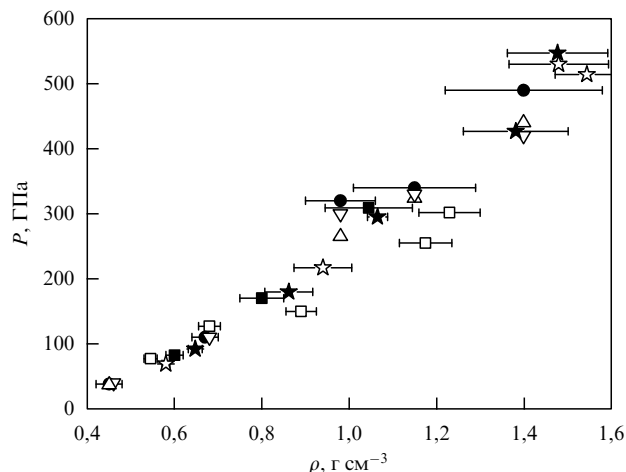


Рис. 12. Квазиизэнтропическое сжатие дейтерия и протия: Δ (H_2) — [5], ∇ (H_2) — [6], $\bullet$ (H_2) — [7, 11], $\blacksquare$ (D_2) — [19, 20], $\square$ (D_2) — [21], $\star$ (D_2), $\star$ (H_2) — [22].

давлений в водороде и алюминии сравнительно невелико). В принципе при использовании режима многокадровой съёмки методика [22] позволяет в одном опыте получать информацию по сжатию водорода практически во всём диапазоне давлений, последовательно (в процессе сжатия) реализуемых в экспериментальном устройстве.

В опытах [22] вследствие низкой начальной температуры вещества конечная реализуемая температура также является сравнительно низкой (по оценкам не превышает нескольких сотен градусов Кельвина при максимальных реализованных давлениях).

На рисунке 12 в P – ρ -координатах приведены все имеющиеся результаты по квазиизэнтропическому сжатию протия и дейтерия (при их сопоставлении экспериментальная плотность дейтерия уменьшена вдвое). Данные [5–7, 11] носят немонотонный характер, со сменой характера сжимаемости при ≈ 300 ГПа, что трактовалось в этих работах как переход молекулярного протия в атомарное состояние. Результаты [19, 20] хорошо согласуются с данными [5–7, 11] на их первом (до ≈ 300 ГПа) участке. В целом не противоречат данным [5–7, 11] и результаты [22], причём в последних также просматривается немонотонность поведения кривой сжатия с изменением сжимаемости при $P \approx 300$ ГПа. При этом, поскольку реализуемая в опытах [22] температура меньше, чем в [5–7, 11], наблюдается вполне нормальное превышение (на изобарах) плотностью вещества, зарегистрированной в [22], плотности, полученной в [5–7, 11].

Таким образом, имеется удовлетворительное согласие совокупности результатов [5–7, 11, 19, 20, 22] со сменой характера сжимаемости водорода при давлении ≈ 300 ГПа.

Существенно отличаются от всех перечисленных данных результаты работы [21], в которой констатируется примерно 20%-ный скачок плотности при $P \approx 150$ ГПа. На наш взгляд, причиной расхождения данных является переоценка авторами [21] точности своих результатов. Действительно, как показывает анализ их данных, погрешность в экспериментальном определении плотности и расчётном определении давления в [21] существенно

превосходит величины, указанные в этой работе. Об этом свидетельствует, в частности, следующий факт. В [19, 20] той же группой авторов, что и в [21], делается вывод о согласии с точностью до экспериментальной ошибки полученных ими результатов с данными [5–7], а в последующей публикации [21] (без комментариев и упоминаний прежних выводов [19, 20]) — о принципиально ином поведении кривой изэнтропического сжатия.

6. Уравнения состояния протия и дейтерия

В данном разделе проведено описание результатов экспериментов с использованием двух различных форм уравнения состояния. Сначала рассматривается уравнение состояния [11, 24], в котором отражено поведение вещества в твёрдом и жидком состояниях.

6.1. Уравнение состояния протия и дейтерия в твёрдом и жидком состояниях

6.1.1. Уравнение состояния твёрдой фазы. Свободная энергия кристаллического твёрдого тела имеет вид

$$F_{\text{solid}} = E_{\text{cold}}(\rho) + 1,125R\theta + RT \left\{ 3 \ln \left[1 - \exp \left(-\frac{\theta}{T} \right) \right] - D \left(\frac{\theta}{T} \right) \right\} + F_{\text{vib rot}}(\rho, T) + F_{\text{elec}}(\rho, T), \quad (1)$$

где T и ρ — температура и плотность, R — газовая постоянная, $\theta(\rho)$ — дебаевская температура, $D(x)$ — функция Дебая,

$$D(x) = 3x^{-3} \int_0^x \frac{x^3 dx}{\exp x - 1}.$$

Первое слагаемое в правой части (1) соответствует потенциалу взаимодействия молекул в кристалле, второе и третье описывают нулевые и тепловые колебания в кристалле. Четвёртое и пятое слагаемые соответственно описывают вращение и колебание атомов в молекуле, находящейся в ячейке кристалла, и тепловое возбуждение электронов. Для практических целей наиболее приемлемыми оказались следующие зависимости:

$$E_{\text{cold}} = \frac{3}{\rho_{\text{cr}}} \sum_i a_i \left(\frac{\delta^{i/3} - 1}{i} \right),$$

$$\theta = \theta_0 \delta^{1/3} \left(C_{\text{cold}}^2 - \frac{2nP_{\text{cold}}}{3\rho} \right)^{0,5},$$

где $\delta = \rho/\rho_{\text{cr}}$, $P_{\text{cold}} = \rho^2 dE_{\text{cold}}/d\rho$, $C_{\text{cold}}^2 = dP_{\text{cold}}/d\rho$, ρ_{cr} — плотность кристалла при $P_{\text{cold}} = 0$, n — эмпирический параметр. В формулах для E_{cold} эмпирическими параметрами являются также четыре коэффициента a_i . Три из них определяются из условий описания плотности твёрдой фазы при нулевой температуре и температуре плавления при атмосферном давлении и известном значении энергии связи. Четвёртый коэффициент определяется из условия описания одной экспериментальной точки на изотерме. Параметр θ_0 находится из экспериментального значения дебаевской температуры. Для изотопов водорода в работе принято $n = 1,5$. С такой величиной n несколько лучше описываются экспериментальные изотермы в твёрдой фазе при низких температурах.

У молекул изотопов водорода вращательная температура заметно выше нормальной температуры плавления: $\theta_{\text{rot } 0} = 87,6$ К для H_2 и $\theta_{\text{rot } 0} = 43,8$ К для D_2 . Поэтому вращательную составляющую в уравнении состояния необходимо учитывать уже при описании кривой плавления. У молекулы водорода колебательная температура существенно выше вращательной: для H_2 $\theta_{\text{vib } 0} = 6331$ К, для D_2 $\theta_{\text{vib } 0} = 4483$ К. При высоких температурах необходимо также учитывать диссоциацию молекул, находящихся в узлах кристаллической решётки молекулярного водорода, а также ионизацию. Здесь эта составляющая принята в предложенной в [12] аналитической форме, в которой учитывается зависимость энергии диссоциации и ионизации от плотности:

$$F_{\text{vib rot}} = RT(\ln Q_{\text{vib}} - \ln Q_{\text{rot}}),$$

где

$$Q_{\text{vib}} = \frac{1 - \exp(-\omega/T)}{1 - \exp(-\varphi/T)},$$

$$\omega = \frac{\theta_{\text{vib}}}{1 + TC_T}, \quad \varphi = \frac{\theta_{\text{dis}}}{1 + TC_T}, \quad C_T = \frac{0,125\theta_{\text{vib}}}{\theta_{\text{dis}}^2},$$

$$\theta_{\text{vib}} = \theta_{\text{vib } 0} \left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)^{G_{\text{vib}}}, \quad G_{\text{vib}} = 0, 1,$$

$$\theta_{\text{dis}} = \theta_{\text{dis } 0} \left\{ 1 - \exp \left[2,885 \left(1 - \frac{\rho_d}{\rho} \right)^{1/3} \right] \right\}^2,$$

$$Q_{\text{rot}} = (1 + x^2 + x^3)^{1/3}, \quad x = \frac{T}{\theta_{\text{rot}}} \left[1 - \exp \left(-\frac{\theta_{\text{dis}}}{T} \right) \right],$$

$$\theta_{\text{rot}} = \theta_{\text{rot } 0} \left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)^{G_{\text{rot}}}, \quad G_{\text{rot}} = 0, 1,$$

$\rho_1 = 0,088$ г см⁻³, $\rho_d = 4$ г см⁻³ для H_2 и $\rho_1 = 0,199$ г см⁻³, $\rho_d = 8$ г см⁻³ для D_2 , $\theta_{\text{dis } 0} = 28000$ К для обоих изотопов.

При температурах более 1 эВ в конденсированном молекулярном водороде необходимо учитывать вклад в свободную энергию электронной составляющей. Для диэлектриков эта составляющая, в соответствии с зонной теорией, имеет вид

$$F_{\text{elec}} = -\frac{4kT}{\rho} \sqrt{n_p n_n} \left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right) \exp \left(-\frac{W}{2kT} \right),$$

где m^* — среднее геометрическое эффективных масс электрона и дырки, k и h — постоянные Больцмана и Планка, n_p и n_n — орбитальное вырождение в зонах, $W = W_0 \ln(\rho_e/\rho)$, ρ_e — плотность, при которой энергетическая щель закрывается. Выбор величины ρ_e в настоящее время является проблематичным. Значение W_0 определяется экспериментальным значением W при нормальной плотности. В настоящей статье принято $\rho_e = 3$ г см⁻³ для H_2 и $\rho_e = 6$ г см⁻³ для D_2 , для обоих изотопов $W_0 = 3,6$ эВ.

6.1.2. Уравнение состояния жидкой фазы. Уравнение состояния жидкой фазы и метод определения его параметров с учётом кривой плавления были предложены в [24]. Их успешное применение было показано на примере ионных кристаллов, металлов и благородных газов. Основная идея подхода, предложенного в [24], заключается в утверждении, что структура и уравнение состоя-

ния жидкой фазы вблизи кривой плавления весьма близки к структуре и уравнению состояния кристалла. Это означает, что их упругие составляющие в уравнении для твёрдой и жидкой фаз одинаковы, но в уравнении для жидкой фазы должна присутствовать поправка, описывающая наличие "дырок" в структуре этой фазы. Свободная энергия жидкости имеет вид

$$F_{\text{liq}} = F_{\text{sol}} - 3RT \ln \alpha(\rho, T). \quad (2)$$

Функция $\alpha(\rho, T)$ удовлетворяет двум предельным условиям:

- 1) F_{liq} плавно переходит при высоких температурах в свободную энергию идеального газа;
- 2) скачки энтропии $\Delta S = S_{\text{liq}} - S_{\text{sol}}$ и удельного объёма $\Delta V = V_{\text{liq}} - V_{\text{sol}}$ в точке плавления при атмосферном давлении соответствуют известным экспериментальным значениям. Для удовлетворения этих условий функция $\alpha(\rho, T)$ принята в виде

$$\alpha = (1+z)^{-0.5} \exp \left[b(T) - f(\sigma) \frac{T_0}{T} \right],$$

где

$$z = \frac{L_z RT}{C_{\text{cold}}^2 - 2nP_{\text{cold}}/(3\rho)},$$

L_z — постоянная, T_0 — температура плавления при $P = 0$. Предельные условия не накладывают ограничений на функции $f(\sigma)$ и $b(\sigma, T)$. Для определённости расчётов последние приняты в виде

$$f(\sigma) = c_0 + \sum_i c_i(\sigma^i - 1), \quad b(T) = b_0 + b_1 \left(\frac{T_0}{T} \right)^2,$$

где $\sigma = \rho/\rho_{\text{liq}}$, ρ_{liq} — плотность жидкой фазы при T_0 , $c_1 - c_4$ и b_0, b_1 — эмпирические постоянные, которые находятся из значений термодинамических параметров на кривой плавления при нормальном давлении и в одной или двух точках при высоком давлении; величинами b_0 и b_1 определяется вид зависимости теплоты плавления от давления вдоль кривой плавления. Учитывалась и величина теплоёмкости жидкости в точке плавления при атмосферном давлении. Отметим также, что функция $f(\sigma)$ эффективно учитывает появление "дырок" в структуре жидкой фазы и связанное с этим изменение энергии упругого взаимодействия атомов.

6.1.3. Уравнение состояния твёрдого атомарного водорода.

Расчётно-теоретическое исследование свойств атомарного водорода было выполнено Ю.М. Каганом с сотрудниками [47]. Здесь приведены использованные ими зависимости энергии упругого взаимодействия атомов и энергии нулевых колебаний (Zero-Point Oscillation, ZPO) от плотности с параметрами, вычисленными в той же работе:

$$\begin{aligned} E_{\text{cold}}(\rho) &= a_{a0} + a_{a1}x^2 + a_{a2}x + a_{a3}x^{-1} + \\ &\quad + a_{a4}x^{-2} + (a_{a5} + a_{a6}x^{-1}) \ln \rho, \\ E_{\text{ZPO}}(\rho) &= 1,125 R\theta = (B_{a1}x^2 + B_{a2}x + B_{a3})x^{-0.5} + B_{a4}, \end{aligned}$$

где $x^3 = \rho$ [г см⁻³].

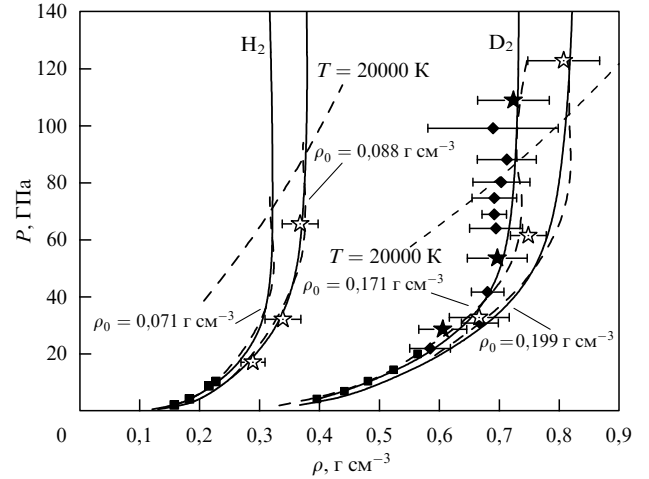


Рис. 13. Ударные адиабаты исходно жидкого и твёрдого дейтерия и протия. Сплошные кривые — результат расчёта по УРС из раздела 6.1, штриховые — по УРС из раздела 6.2. Изотермы $T = 20000$ К — расчёт по УРС из раздела 6.2. Обозначения экспериментальных данных аналогичны обозначениям на рис. 8, 9.

Состояние твёрдого и жидкого атомарного водорода описывается соответственно уравнениями (1) и (2) (естественно, без составляющей $F_{\text{vib rot}}$). При проведении вычислений в этом разделе конденсированный атомарный водород рассматривается как металл. В металлах влияние электронов уже при низких температурах начинает проявляться в твёрдой фазе. Электронная составляющая для свободной энергии металла, принятая в настоящей статье, имеет вид

$$F_{\text{elec}} = -1,5 RT\eta \int_0^x \ln(\cosh x) dx,$$

где $x = \beta_{\text{elec}} T / (1,5 R \eta)$, β_{elec} — коэффициент электронной теплоёмкости, η — число электронов в зоне проводимости, приходящееся на один атом, R — газовая постоянная. Для водорода $\eta = 1$. Согласно зонной теории металла $\beta_{\text{elec}} = 1,36 \times 10^{-4}$ Дж г⁻¹ К⁻² для Н и $\beta_{\text{elec}} = 1,08 \times 10^{-4}$ Дж г⁻¹ К⁻² для D.

Все параметры для твёрдой и жидкой фаз молекулярных и атомарных изотопов водорода приведены в табл. 4. Сопоставление расчётных ударных адиабат, изэнтроп, изотерм и кривой плавления с экспериментальными данными по этим характеристикам проведено на рис. 13–15. Видно удовлетворительное согласие. Это свидетельствует о том, что рассматриваемое уравнение состояния позволяет непротиворечиво описать большую часть теплофизических свойств водорода.

6.2. Модифицированное уравнение состояния Ван-дер-Ваальса

Для описания экспериментальных данных по сжимаемости изотопов водорода также использовалась модифицированная модель Ван-дер-Ваальса (ВдВ) [25, 45, 46, 50], применяемая, в том числе, для смесей веществ. При построении УРС рассматривались компоненты H₂, Н, УРС дейтерия — D₂, D. Кроме диссоциации в модели принципиально возможен также учёт ионизации, но здесь она не принимается во внимание.

Термическое ($P-T-V$ -связь) уравнение состояния индивидуальных компонентов определяется в парамет-

Таблица 4. Параметры уравнений состояния твёрдой и жидкой фаз молекулярного и атомарного водорода — протия и дейтерия

Молекулярная фаза*			Атомарная фаза**		
	H ₂	D ₂		H	D
$\rho_{\text{cr}}, \text{г см}^{-3}$	0,1167	0,2487	$a_{a0}, \text{кДж моль}^{-1}$	1300	1305
n	1,5	1,5	$a_{a1}, \text{кДж моль}^{-1}$	1486,5	1486,5
$\theta_0, \text{К с км}^{-1}$	73,81	87,63	$a_{a2}, \text{кДж моль}^{-1}$	–2535	–2535
$a_1, \text{ГПа}$	–0,24	–0,33	$a_{a3}, \text{кДж моль}^{-1}$	–26,9	–26,9
$a_2, \text{ГПа}$	2,8	3,66	$a_{a4}, \text{кДж моль}^{-1}$	–90,8	–90,8
$a_3, \text{ГПа}$	–7,16	–8,99	$a_{a5}, \text{кДж моль}^{-1}$	–20,2	–20,2
$a_4, \text{ГПа}$	4,6	5,66	$a_{a6}, \text{кДж моль}^{-1}$	–10,9	–10,9
L_z	4	3	$B_{a1}, \text{кДж моль}^{-1}$	49,2	49,2
b_0	0,4527	0,4271	$B_{a2}, \text{кДж моль}^{-1}$	–50,8	–50,8
B_1	0,05	0,03	$B_{a3}, \text{кДж моль}^{-1}$	–16,9	–16,9
c_0	0,4028	0,3699	$B_{a4}, \text{кДж моль}^{-1}$	43,0	35,2
c_1	–150,98	–143,86			
c_2	140,2	137,93			
c_3	–55	–56			
c_4	10	10			
$T_0, \text{К}$	13,8	18,6	$T_{\text{ТР}}, \text{К}$	2379	2529
$T_{\text{boil}}, \text{К}$	20,4	23,6	$\rho_{\text{ТР}}, \text{г см}^{-3}$	1,0899	2,20625
$\rho_1(T = 1 \text{ К}), \text{г см}^{-3}$	0,0880	0,1990	$P_{\text{ТР}}, \text{ГПа}$	388,3	388,5
$\rho_{\text{sol}}(T = T_0), \text{г см}^{-3}$	0,0875	0,1965			
$\rho_{\text{liq}}(T = T_0), \text{г см}^{-3}$	0,0780	0,1760			
$\rho_{\text{boil}}(T = T_{\text{boil}}), \text{г см}^{-3}$	0,0705	0,1709			
$\theta(\rho_1), \text{К}$	105	105			

* Индексом "boil" отмечены параметры, соответствующие кипению (при $P = 0,1 \text{ МПа}$).

** Индексом ТР (triple point) отмечены параметры тройной точки на фазовой диаграмме рис. 16.

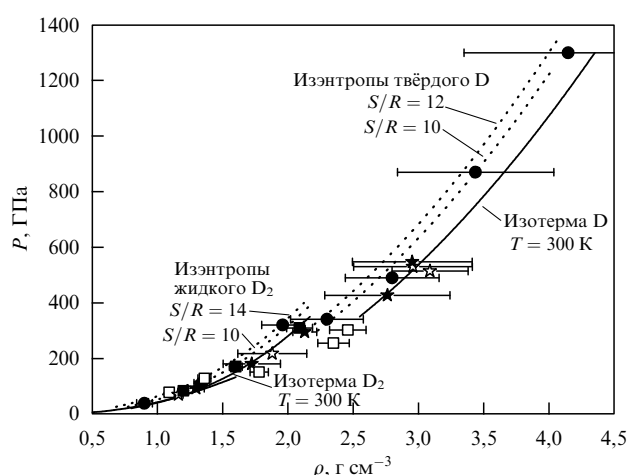


Рис. 14. Изэнтропы и изотермы молекулярного и атомарного дейтерия. Результаты расчёта по УРС из раздела 6.1. Обозначения экспериментальных данных аналогичны обозначениям на рис. 12. Плотность протия увеличена в два раза. Кривые — расчётные зависимости. Утолщённый отрезок кривой — изотерма [48].

рической форме (посредством введения дополнительной внутренней переменной — давления отталкивания P^{rep})

соотношениями

$$P = P^{\text{rep}} - a \left(\frac{N_0}{V} \right)^2, \quad (3)$$

$$P^{\text{rep}} = \frac{N_0 k T}{V - V_C}, \quad (4)$$

$$V_C = V_C(P^{\text{rep}}), \quad (5)$$

где $N_0 = \text{const}$ — число частиц в единице массы $V = 1/\rho$, k — постоянная Больцмана, $a = \text{const}$ — параметр притяжения. Коволлюм V_C является эмпирической функцией переменной P^{rep} (при $V_C(P^{\text{rep}}) = \text{const}$ модель (1)–(3) переходит в исходную модель ВдВ). Для представления коволлюма (5) в диапазоне состояний $0 < P^{\text{rep}} < P_*$ ($P_* = \text{const}$ — параметр) использовалась зависимость

$$V_C = V_0 \left[1 - \frac{\ln(P^{\text{rep}}/A)}{\alpha} \right], \quad (6)$$

где V_0, A, α — эмпирические константы (V_0 — эффективный удельный объём жидкости при $T = 0, P = 0$). Из уравнения (4) при $T = 0$ следует, что $V = V_C$. В этом случае соотношения (3), (6) определяют "холодное"

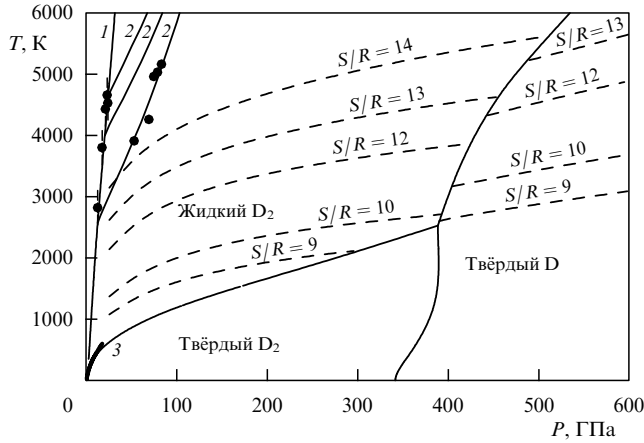


Рис. 15. Фазовая диаграмма, ударные адиабаты и изэнтропы дейтерия по уравнению состояния из раздела 6.1: 1 и 2 — однократная и двукратная адиабаты, ● — эксперимент [3], 3 — кривая плавления, утолщённый участок — эксперимент [49].

давление P_{cold} жидкости как

$$P_{\text{cold}}(V) = A \left\{ \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{V}{V_0} \right) \right] - \left(\frac{V_0}{V} \right)^2 \right\}. \quad (7)$$

При выводе (7) считается, что в (3) $a = AV_0^2/N_0^2$. Надлежащий выбор констант в (7) позволяет в рамках модели (3)–(5) отразить экспериментальную сжимаемость жидкости в диапазоне умеренных плотностей. Формула (7) становится малоприменимой, когда плотность значительно превышает криогенную. Поэтому в диапазоне $P^{\text{rep}} \geq P_*$ для V_C вместо (6) применялось следующее выражение:

$$V_C = B \left(\frac{P_*}{P^{\text{rep}}} \right)^d + C \left(\frac{P_*}{P^{\text{rep}}} \right)^f, \quad (8)$$

где $B, d, C, f = \text{const}$. Значение одной из этих констант (а именно d) фиксируется, остальные определяются из условий плавного сшивания (по значению функции V_C и её двух первых производных) выражений (6) и (8) при $P^{\text{rep}} = P_*$. Принятые значения параметров ($\rho_0 = 1/V_0$) компонентов приведены в табл. 5.

Свободная энергия F , отвечающая термическому УРС (3)–(5), определяется (в собственных для неё переменных V, T совместно с формулами (4), (5)) выражением

$$F = E^{\text{rep}}(P^{\text{rep}}) + E^{\text{att}}(V) - N_0 k T \ln \frac{e T^{5/2} \sigma(T) r}{P^{\text{rep}}}, \quad (9)$$

где

$$E^{\text{rep}} = - \int_0^{P^{\text{rep}}} P^{\text{rep}} \left[\frac{dV_C(P^{\text{rep}})}{dP^{\text{rep}}} \right] dP^{\text{rep}},$$

$$E^{\text{att}} = - \int_{\infty}^V P^{\text{att}}(V) dV,$$

e — основание натурального логарифма, $r = = k^{5/2} [m / (2\pi \hbar^2)]^{3/2}$, m — масса частицы, $\hbar$ — постоянная Планка, $\sigma(T)$ — внутренняя статистическая сумма индивидуальной частицы, $P^{\text{att}} = -a(N_0/V)^2$ — давление притяжения.

Таблица 5. Параметры в формулах (7), (8) для протия и дейтерия

Параметр	H ₂	H	D ₂	D
ρ_0 , г см ⁻³	0,094	0,7	0,208	1,4
A , ГПа	0,0552	40	0,0781	40
α	7,335	5	7,298	5
P_* , ГПа	3,588	200	3,122	200
B , см ³ г ⁻¹	4,5926	1,8755	2,4677	0,9376
d	0,33	0,5	0,33	0,5
C , см ³ г ⁻¹	-0,00848	-0,9072	-0,08995	-0,4536
f	7,680	0,719	1,729	0,719

При определении $\sigma(T)$ использовались данные относительно приведённого потенциала Гиббса $\Phi_0(T)$ на изобаре $P = P_0 = 1$ атм и энтальпии образования H_0 (при $T = 0$) атомов и молекул из справочника [51]. Функция $\sigma(T)$ связана с ними следующим соотношением:

$$\ln \frac{T^{5/2} \sigma(T) r}{P_0} = \frac{T \Phi_0(T) - H_0}{N_A k T},$$

где N_A — число Авогадро. Диапазон представления $\Phi_0(T)$ в [51] ограничен температурой $T = 20000$ К.

Для описания смесей модель (4), (5), (9) обобщается:

$$F = E^{\text{rep}}(P^{\text{rep}}, \{N\}) + E^{\text{att}}(V, \{N\}) - k T \sum_{i=1}^n N_i \ln \frac{e N T^{5/2} \sigma_i(T) r_i}{N_i P^{\text{rep}}}, \quad (10)$$

$$V = V_C(P^{\text{rep}}, \{N\}) + \frac{N k T}{P^{\text{rep}}}, \quad (11)$$

где

$$E^{\text{rep}} = - \int_0^{P^{\text{rep}}} P^{\text{rep}} \left[\frac{\partial V_C(P^{\text{rep}}, \{N\})}{\partial P^{\text{rep}}} \right]_{\{N\} = \text{const}} dP^{\text{rep}}, \quad (12)$$

$$E^{\text{att}} = - \int_{\infty}^V P^{\text{att}}(V, \{N\})_{\{N\} = \text{const}} dV. \quad (13)$$

Здесь i — номер сорта частицы; n — полное число сортов, учитываемых в модели (в рассматриваемых здесь случаях протия и дейтерия $n = 2$); N_i — число частиц каждого сорта ($i = 1, \dots, n$) в единице массы вещества; $\{N\}$ — обозначение ряда $N_1, N_2, \dots, N_n$, определяющего состав смеси; $N = \sum_{i=1}^n N_i$ — полное число частиц. В (10)–(13) учтена зависимость смесового коволюна V_C и притяжения P^{att} от состава $\{N\}$. Интегралы (12), (13) берутся при всех $N_i = \text{const}$. Из (10)–(13) следует выражение для давления

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T, \{N\}} = P^{\text{rep}} + P^{\text{att}},$$

которое совместно с (11) является обобщением термического УРС (3)–(5).

Функции V_C и P^{att} в (10)–(13) определялись на основе аналогичных характеристик отдельных компонентов по правилам, достаточно хорошо показавшим себя при использовании модели ВдВ для смесей [52]. Для ково-

люма смеси используется аддитивное соотношение

$$V_C(P^{\text{rep}}, \{N\}) = \sum_{i=1}^n N_i v_{Ci}(P^{\text{rep}}),$$

где коволом v_{Ci} относится к одной i -й частице. Притяжение смеси определяется выражением

$$P^{\text{att}} = -a_{\text{mix}} \left(\frac{N}{V} \right)^2,$$

где

$$a_{\text{mix}}^{1/2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n N_i a_i^{1/2}.$$

Здесь a_i — характеристика притяжения i -го компонента (величина a в правой части формулы (3)).

Равновесные значения N_i находятся (при фиксированных значениях переменных P^{rep} и T с привлечением балансных соотношений) из уравнений

$$\sum_r v_r^l \mu_r = \sum_s v_s^l \mu_s,$$

где $v_{r(s)}^l$ — стехиометрические коэффициенты, l — номер химической реакции, r и s — индексы исходных и конечных продуктов реакции соответственно, $\mu_j = (\partial F / \partial N_j)_{V, T, j \neq i}$ — химический потенциал j -й частицы.

После определения состава по модельным формулам рассчитываются необходимые термодинамические величины.

На рисунке 16 представлены результаты опытов по изотермическому сжатию протия в области относительно низких давлений и данные по его испарению [53] в сравнении с соответствующими расчётными значениями. Такое же удовлетворительное согласие между экспериментальными и расчётными результатами наблюдается и для дейтерия.

Сравнение результатов модельных расчётов с данными изотермического ($T = 300$ К) эксперимента [54, 55] при более высоких давлениях приводится на рис. 17. Приблизительно так же модель описывает результаты опытов [54, 55] и при температурах меньших комнатной.

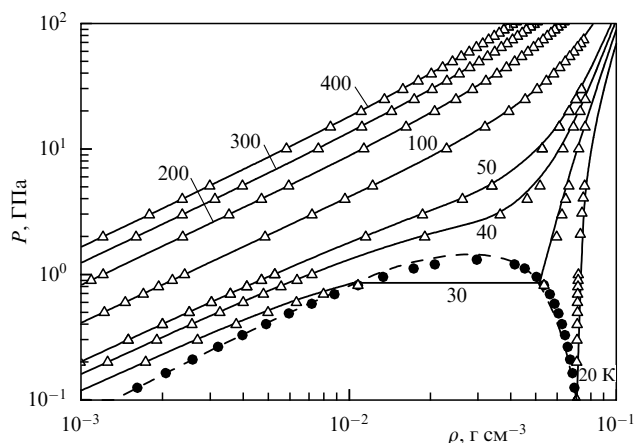


Рис. 16. Зависимость давления от плотности вдоль изотерм и кривой равновесия жидкость — пар для протия. Символами показаны данные [53], кривыми — результаты расчёта (на изотермах указана температура).

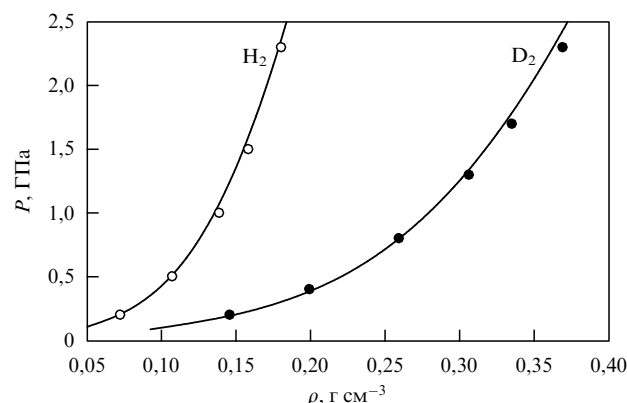


Рис. 17. Изотермическое ($T = 300$ К) сжатие протия и дейтерия. Символами показаны данные [54, 55], кривыми — результаты расчёта.

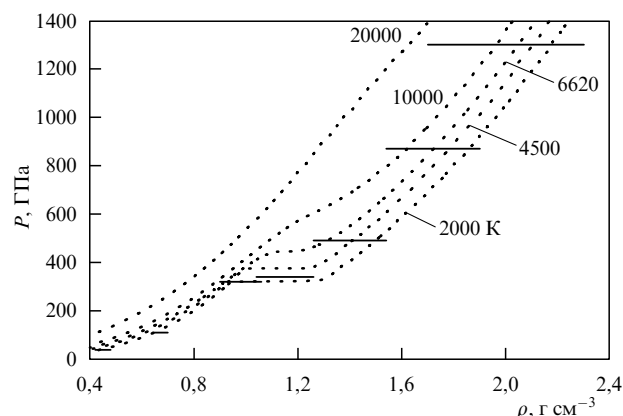


Рис. 18. Данные [11] по квазиизэнтропическому сжатию протия (длина горизонтальных отрезков отражает погрешность определения плотности) и модельные изотермы.

На рисунке 13 приведены экспериментальные и расчётные данные по ударному сжатию исходно жидкого (при начальных плотностях $\rho_0 = 0,071$ и $0,171$ г см⁻³) и твёрдого ($\rho_0 = 0,088$ и $0,199$ г см⁻³) протия и дейтерия. Немонотонное поведение расчётных ударных адиабат связано с диссоциацией.

В области состояний, исследованной в квазиизэнтропических экспериментах, модель, описанная в этом разделе, была ориентирована на воспроизведение данных [11]. На рисунке 18 приведён ряд модельных изотерм, в том числе изотермы ≈ 2000 – 7000 К, соответствующие, согласно УРС [11], условиям рассматриваемых квазиизэнтропических опытов. Немонотонное поведение расчётных изотерм обусловлено диссоциацией протия (ниже критической точки с модельными параметрами $T \approx 6620$ К, $P \approx 445$ ГПа, $\rho \approx 1,16$ г см⁻³ имеет место фазовый переход первого рода). Подобным образом ведут себя и модельные изотермы дейтерия.

Как видно из рис. 13–18, оба рассмотренных вида уравнений состояния, в целом, удовлетворительно соответствуют экспериментальным данным.

7. Заключение

Сформулируем основные результаты, представленные в настоящей статье:

• получены ударные адиабаты жидкого и твёрдого в исходном состоянии дейтерия до давлений в 120 ГПа, а также твёрдого протия до давлений в 66 ГПа. Данные по твёрдому дейтерию и протию являются единственными в мировой практике подобных исследований;

• данные ВНИИЭФ и Национальной лаборатории Сандиа не подтверждают аномально высокой сжимаемости дейтерия, обнаруженной в LLNL с использованием лазерной установки "Nova";

• при небольшой экстраполяции зависимости $D(\rho_0)$ до плотности жидкого протия, получена его ударная адиабата в диапазоне давлений, соответствующих давлениям в экспериментах по твёрдому протию;

• анализ результатов ударного сжатия изотопов водорода показывает, что наиболее вероятное объяснение полученных зависимостей — переход водорода (дейтерия) в атомарное состояние в результате диссоциации молекул под действием температуры и давления в ударной волне;

• анализ данных по квазиизэнтропическому сжатию протия и дейтерия показывает, что при давлениях ≈ 300 ГПа происходит смена наклона кривой их сжатия;

• реально существующие погрешности в экспериментальных данных по квазиизэнтропическому сжатию не позволяют согласиться с выводом о скачкообразном изменении плотности на адиабате дейтерия при давлениях 150 ГПа;

• описание экспериментальных данных по изотопам водорода двумя уравнениями состояния показывает удовлетворительное согласие экспериментальных и расчётных зависимостей в рамках допущений, лежащих в основе моделей расчётов.

Выполнение исследований потребовало напряжённой работы большого коллектива сотрудников института. В проведении первой её части — исследований ударного сжатия изотопов водорода — существенная роль принадлежит Г.В. Симакову, А.Н. Шуйкину, А.Я. Матвееву, С.И. Белову, Г.В. Борискову, А.И. Быкову и их помощникам. В краткие сроки им удалось решить сложный вопрос об использовании криогенной техники в специфических условиях сферических взрывных измерительных систем и провести многочисленные сложные эксперименты по ударному сжатию изотопов водорода. Значительная часть экспериментальных данных по квазиизэнтропическому сжатию получена группой С.Б. Кормера и Ф.В. Григорьева в 70-е годы прошлого века. Многие из их пионерских результатов до сих пор остаются непревзойдёнными в подобных исследованиях. Данные последних лет, полученные в группах Жерноклетова–Мочалова (В.А. Аринин, С.И. Киршанов, А.Б. Межевов и др.) и Быкова–Борискова (С.И. Белов, Н.Б. Лукьянов и др.) на системах с цилиндрическим разгоном оболочек, существенно дополнили пионерские измерения Кормера–Григорьева, позволив провести общий анализ результатов работ по этому направлению. Особенно значительны исследования "холодного" сжатия дейтерия и протия, полученные группой Быкова–Борискова с использованием в качестве энергетического источника для разгона оболочек сильного магнитного поля.

Авторы с большой признательностью отмечают интерес к результатам работы, проявленный В.П. Копышевым и В.В. Хрусталёвым, и полезные обсуждения с ними теоретических сторон работы. Авторы с благодарностью отмечают полезные дискуссии по всем эксперименталь-

ным аспектам исследований, способствующие успешному их проведению, с сотрудником Калифорнийского университета В. Неллисом. В процессе исследований большое число расчётных работ как по оптимизации постановки экспериментов, так и по их обработке было проведено О.Л. Михайловой, И.Р. Труниным, И.А. Терёшкиной и сотрудниками их групп. Большую помощь в оформлении работы оказала авторам Л.И. Канунова.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-02-00375.

Список литературы

1. Van Thiel M, Alder B J *Mol. Phys.* **10** 427 (1966)
2. Dick R D, Kerley G I *J. Chem. Phys.* **73** 5264 (1980)
3. Nellis W J et al. *J. Chem. Phys.* **79** 1480 (1983)
4. Van Thiel L M et al. *Phys. Rev. Lett.* **31** 979 (1973)
5. Григорьев Ф В и др. *Письма в ЖЭТФ* **16** 286 (1972) [Grigor'ev F V et al. *JETP Lett.* **16** 201 (1972)]
6. Григорьев Ф В и др. *ЖЭТФ* **69** 967 (1975) [Grigor'ev F V et al. *Sov. Phys. JETP* **42** 378 (1975)]
7. Григорьев Ф В и др. *ЖЭТФ* **75** 1683 (1978) [Grigorev F V et al. *Sov. Phys. JETP* **48** 847 (1978)]
8. Da Silva L B et al. *Phys. Rev. Lett.* **78** 483 (1997)
9. Collins G W et al. *Science* **281** 1178 (1998)
10. Копышев В П, Хрусталёв В В *ПМТФ* (2) 122 (1980) [Копышев В П, Хрусталёв В В *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **21** 113 (1980)]
11. Копышев В П, Урлин В Д, в кн. *Ударные волны и экстремальные состояния веществ* (Под ред. В Е Фортова и др.) (М.: Наука, 2000) с. 297
12. Kerley G I "Equations of state hydrogen and deuterium", SANDIA REPORT sand 2003-3613 Unlimited Release Print (2003)
13. Holmes N C, Ross M, Nellis W J *Phys. Rev. B* **52** 15835 (1995)
14. Knudson M D et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 225501 (2001)
15. Knudson M D et al. *Phys. Rev. B* **69** 144209 (2004)
16. Hicks D G et al. *Phys. Rev. B* **79** 014112 (2009)
17. Альтшулер Л В, Крупников К К, Бражник М И *ЖЭТФ* **34** 886 (1958) [Al'tshuler L V, Krupnikov K K, Brazhnik M I *Sov. Phys. JETP* **7** 614 (1958)]
18. Hawke R et al. *Phys. Earth Planet. Inter.* **6** 44 (1972)
19. Ильяев Р И и др., в сб. *5-е Харитоновские чтения* (Под ред. А Л Михайлова) (Саров, 2005) с. 108
20. Il'kaev R I et al. *AIP Conf. Proc.* **706** 73 (2004)
21. Fortov V E et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 185 (2007)
22. Boriskov G V et al. *Joint 21st AIRAPT and 45th EHPRG Intern. Conf. on High Pressure and Technology, Catania, Italy, 2007*, p. 421
23. Альтшулер Л В и др. *УФН* **166** 575 (1996) [Al'tshuler L V et al. *Phys. Usp.* **39** 539 (1996)]
24. Урлин В Д *ЖЭТФ* **49** 485 (1965) [Urlin V D *Sov. Phys. JETP* **22** 341 (1965)]
25. Медведев А Б *Вопр. атомн. науки и техн. Сер. Теор. и прикл. физика* (1) 23 (1992)
26. Сапожников А Т, Першина А В *Вопр. атомн. науки и техн. Сер. Теор. и прикл. физ.* (4) 47 (1979)
27. Глушак Б Л и др. *Вопр. атомн. науки и техн. Сер. Мат. моделир. физ. процессов* (1) 32 (1991)
28. Kerley G I *Int. J. Impact Enging.* **5** 441 (1987)
29. Трунин Р Ф и др., в сб. *Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ* (Под ред. Р Ф Трунина) (Саров, 2001)
30. Boriskov G V et al., in *Intern. Conf. on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics, Book of Abstracts, Nov. 5–10, Santa Fe, New Mexico, USA* (2006) p. 34
31. Белов С И и др. *Письма в ЖЭТФ* **76** 508 (2002) [Belov S I et al. *JETP Lett.* **76** 433 (2002)]
32. Борисков Г В и др. *Докл. РАН* **392** 755 (2003) [Boriskov G V et al. *Dokl. Phys.* **48** 553 (2003)]
33. Boriskov G V et al. *Phys. Rev. B* **71** 092104 (2005)
34. Трунин Р Ф и др. *Письма в ЖЭТФ* **82** 317 (2005) [Trunin R F et al. *JETP Lett.* **82** 284 (2005)]
35. Трунин Р Ф и др. *ЖТФ* **76** (7) 102 (2006) [Trunin R F et al. *Tech. Phys.* **51** 907 (2006)]

36. Трунин Р Ф и др., в сб. *6-е Забавинские научные чтения, 2001 г., тезисы доклада*; см. <http://www.vniitf.ru/rig/confer/6ZST/6ZST.htm>
37. Зельдович Я Б, Райзер Ю П *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений* (М.: Наука, 1966) [Zel'dovich Ya B, Raizer Yu P *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena* (Mineola, NY: Dover Publ., 2002)]
38. Desjarlais M P *Phys. Rev. B* **68** 064204 (2003)
39. Celliers P M et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 5564 (2000)
40. Collins G W et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 165504 (2001)
41. Nellis W J *Phys. Rev. Lett.* **89** 165502 (2003)
42. Nellis W J et al. *Phys. Rev. B* **59** 5 (1999)
43. Гришечкин С К и др., в сб. *7-е Харитоновские чтения* (Под ред. А Л Михайлова) (2005)
44. Павловский А И и др., в кн. *Сверхсильные магнитные поля* (Под ред. В М Титова, Г А Швецова) (М.: Наука, 1984) с. 19
45. Kopyshov V P, Medvedev A B *Sov. Tech. Rev. B Therm. Phys. Rev.* **5** 371 (1993)
46. Медведев А Б, в кн. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества* (Под ред. В Е Форткова др.) (М.: Наука, 2000) с. 315
47. Каган Ю М, Пушкарёв В В, Холас А *ЖЭТФ* **73** 967 (1977) [Kagan Yu M, Pushkarev V V, Kholas A *Sov. Phys. JETP* **46** 511 (1977)]
48. Loubeyre P et al. *Nature* **383** 702 (1996)
49. Diatschenko V et al. *Phys. Rev. B* **32** 381 (1985)
50. Медведев А Б, сб. *9-е Харитоновские чтения* (Под ред. А Л Михайлова) (Саров, 2007) с. 318
51. Глушко В П (Ред.) *Термодинамические свойства индивидуальных веществ*. Справочник (М.: Наука, 1978) с. 1–4
52. Вукалович М П, Новиков И И *Уравнение состояния реальных газов* (М.-Л.: Госэнергоиздат, 1948)
53. Thermophysical Properties of Fluid Systems, NIST Webbook, <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid>
54. Mills R L et al. *J. Chem. Phys.* **66** 3076 (1977)
55. Mills R L et al. *J. Chem. Phys.* **68** 2663 (1978)

Dynamic compression of hydrogen isotopes at megabar pressures

R.F. Trunin, V.D. Urlin, A.B. Medvedev

Russian Federal Nuclear Center "All-Russian Research Institute of Experimental Physics",

607190 Sarov, Nizhny Novgorod region, Russian Federation

Tel. (7-831-30) 2-01 27

E-mail: root@gdd.vniief.ru

We review the results of shock compression of solid protium to the pressure 66 GPa, of liquid deuterium to 110 GPa, and of solid deuterium to 123 GPa in explosive devices of spherical geometry. The results are compared with data obtained by US scientists using traditional energy sources (explosives and light gas guns), striker acceleration in a strong magnetic field (Z facility at Sandia), and powerful lasers (Nova at Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) and Omega at the Laboratory for Laser Energetics, University of Rochester). Results of density measurements of hydrogen isotopes under quasi-isentropic compression are analyzed. The absence of an anomalous increase in density under shock and quasi-isentropic compression of hydrogen isotopes is demonstrated. On the other hand, both processes exhibit a sharp change in the compression curve slopes, at the respective pressures 45 and 300 GPa.

PACS numbers: **07.35.+k**, **62.50.-p**, **64.30.-t**

DOI: 10.3367/UFNr.0180.201006d.0605

Bibliography — 55 references

Received 29 September 2009, revised 13 January 2010

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **180** (6) 605–622 (2010)

Physics – Uspekhi **53** (6) (2010)