

**Н. Н. Калиткин, В. Б. Леонас, И. Д. Родионов.** Модели экстремальных состояний вещества и их экспериментальная проверка. Количественное описание физических процессов при высоких температурах ( $\geq 1$  эВ) и давлениях ( $\geq 1$  Мбар) требует знания теплофизических свойств вещества в этих условиях. Область давлений  $\leq 1$  Мбар традиционно изучается методами статического и динамического сжатий. Накоплен большой объем данных, относящихся к плотным веществам, а в последние годы многочисленные измерения выполнены с конденсированными газами (He, Ar, Kr, Xe, CO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> и др.).

К сожалению, пока надежные данные измерений не могут быть получены при давлениях, превышающих 1—5 Мбар; поэтому область больших давлений описывается на основе теоретических моделей.

В газодинамических расчетах сейчас используются в основном две модели. Область газовых плотностей описывается моделью ионизационного и химического равновесия (МИХР)<sup>1</sup>, а в твердотельных — квантостатической моделью (КСМ или ее вариантом ТФП)<sup>2</sup>. «Сшивая» предсказания этих моделей при промежуточных плотностях и присоединяя экспериментальные данные, строят так называемые широкодиапазонные уравнения состояния.

В рамках МИХР удается правильно описать индивидуальность свойств химических элементов и соединений. В то же время КСМ дает лишь усредненные по периодической системе характеристики. Поэтому для сжатого

вещества неоднократно предпринимались попытки построить модели хартри-фоковского типа. Некоторые из них, оказавшиеся ошибочными, предсказывали значительные отклонения от КСМ при сверхсильных сжатиях. Реалистические модели при больших давлениях близки к КСМ, а при умеренных давлениях качественно правильно описывают лишь отдельные вещества; но ни одна из этих моделей не смогла пока описать индивидуальность свойств элементов хотя бы одного периода таблицы Менделеева.

Трудности современных теорий стимулируют развитие экспериментальных подходов. В недоступную прямым экспериментам область холодного

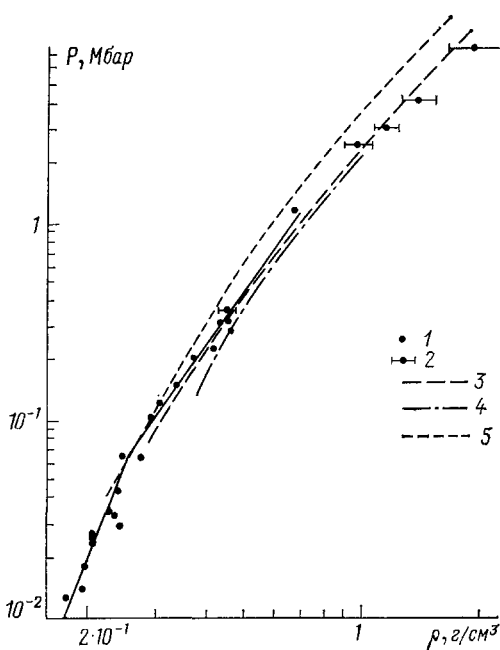


Рис. 1. Кривая холодного сжатия водорода. Эксперимент: 1 — по <sup>4</sup>; 2 — по <sup>5</sup>. Расчеты: 3 — по ТФП <sup>2</sup>; 4 — по КСМ <sup>2</sup>; 5 — по эмпирическому потенциалу <sup>3</sup>. Сплошная линия с изломом — наша обработка данных <sup>4</sup>.

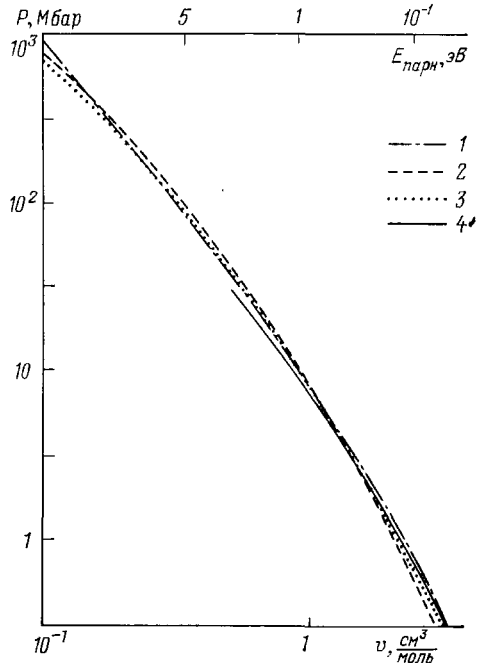


Рис. 2. Кривые холодного сжатия гелия. Расчеты: 1 — по КСМ <sup>2</sup>; 2 — по эмпирическому потенциалу <sup>3</sup>; 3 — по теоретическому потенциалу <sup>1</sup>; 4 — по эффективному эмпирическому потенциалу <sup>4</sup>.  $E_{\text{парн}}$  — энергия взаимодействия на пару атомов

сжатия до давлений  $\sim 10^3$  Мбар позволяет войти нетрадиционный подход, основанный на использовании данных о рассеянии быстрых пучков, позволяющем реализовать тесные сближения атомов, характерные для таких давлений <sup>3</sup>. Из измерений дифференциального и интегрального сечений рассеяния быстрых пучков на малые углы определяют потенциалы взаимодействия практически любых комбинаций атомов и молекул в диапазоне 0,1—20 эВ. В то же время для гелия расстояниям сближения атомов при давлении в 100 Мбар соответствуют энергии парного взаимодействия в  $\sim 5$  эВ, а для ксенона  $\sim 20$  эВ. В предположении преобладающего вклада парных взаимодействий атомов конденсированного вещества эти данные позволяют рассчитывать кривые холодного сжатия путем суммирования парных энергий. Возможности такого подхода иллюстрируются в настоящем сообщении на примере конденсированных He и H<sub>2</sub>. В принципе изучение рассеяния ван-дер-ваальсовых кластеров с одновременной регистрацией осколков позволяет определить границы применимости приближения аддитивности и даже учесть неаддитивные добавки <sup>3</sup>.

На рис. 1 и 2 приведены некоторые результаты выполненных расчетов и проводится сравнение с измерениями кривых холодного сжатия <sup>4,5</sup>.

Расчеты с использованием парных потенциалов выполнены для плотной гексагональной упаковки (различие в энергии между разными видами плотных упаковок в рассматриваемом диапазоне сжатий  $\leq 1\%$ ). Использовались эмпирические парные потенциалы, описывающие отталкивательную часть потенциала<sup>3</sup>. Вследствие короткодействия отталкивательных сил основная часть суммарного давления в изучаемом диапазоне давлений обусловлена взаимодействием с атомами первой координационной сферы (для

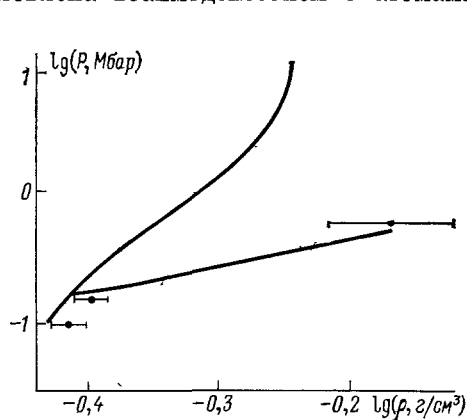


Рис. 3. Первая и вторая ударные адиабаты гелия.

Точки с доверительными интервалами — эксперимент<sup>6</sup>, сплошная линия — расчет по ТФП<sup>2</sup>

молекулярного водорода получены с использованием эффективного сферически-симметричного потенциала, восстановленного из данных рассеяния молекулярных пучков. Более жесткое поведение кривой холодного сжатия молекулярной фазы водорода, полученной описанным способом, по сравнению с измерениями<sup>5</sup> при  $P \gtrsim 3$  Мбар согласуется со сделанными в<sup>5</sup> выводами о наличии в этой области фазового перехода в атомарную фазу. Экспериментальные данные<sup>4</sup>, представленные на рис. 1, были обработаны нами по специальной методике, выявившей фазовый переход при  $P = 70$  кбар на кривой холодного сжатия водорода.

Разумное согласие расчетных и экспериментальных зависимостей на рис. 1, 2 (а также рис. 3, на котором показан расчет первой и второй ударных адиабат He в условиях, соответствующих экспериментальным<sup>6</sup>) дает основание строить широкодиапазонные уравнения состояния водорода, гелия и других благородных газов.

Эти обнадеживающие результаты позволяют считать перспективным развитие микроскопического подхода к изучению сжимаемости на основе использования данных по рассеянию. Важными задачами последнего направления является экспериментальное изучение эффектов неаддитивности взаимодействия в мега-гигабарной области давлений и восстановление из рассеяния молекулярных систем не только эффективных сферически-симметричных потенциалов, но и полных поверхностей потенциальной энергии с учетом анизотропии взаимодействия и зависимости от внутриатомных расстояний в молекулах.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Калиткин Н. Н., Ритус И. В., Миронов А. М. Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов. Препринт ИПМ АН СССР № 46. — Москва, 1983.
2. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. — Физ. плазмы, 1976, т. 2, с. 858.
3. Леонас В. Б., Родионов И. Д. — УФН, 1983, т. 146, с. 7.

He:  $\sim 90\%$  при  $P \sim 10$  Мбар и  $\sim 80\%$  при  $P \sim 100$  Мбар). В приведенных на рисунках расчетах суммирование проводилось только по первой координационной сфере. Получаемая таким образом кривая холодного сжатия He (см. рис. 2) при  $P < 1$  Мбар согласуется с данными, извлеченными из измерений ударного сжатия, а в диапазоне до  $P \sim 600$  Мбар и с асимптотической квантостатистической моделью вещества. Это дает основание рассматривать обрезание суммирования на первой координационной сфере как эффективный способ учета неаддитивных добавок в диапазоне сжатий до давлений в несколько сотен Мбар.

Представленные на рис. 1 результаты расчета холодной сжимаемости

4. V a n S t r a a t e n J., W i j n g a a r d e n R. J., S i l v e r a I. J. F.— Phys. Rev. Lett., 1982, v. 48, p. 97.
5. Г р и г о р ь е в Ф. В., К о р м е р С. Б. и др.— Письма ЖЭТФ, 1972, т. 16, с. 286.
6. N e l l i s W. J. et al.— Phys. Rev. Lett., 1984, v. 53, p. 1248.
7. К а п ы ш е в В. К., С т а р ы х В. В.— ДАН СССР, 1976, т. 230, с. 830.