
**ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА
И ТЕРМОХИМИЯ**

УДК 536.4

АНАЛИЗ ДАННЫХ ПО УДАРНОМУ СЖАТИЮ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ© 2020 г. Д. К. Белашенко^{a,*}^aНациональный исследовательский технологический университет “Московский институт стали и сплавов”,
Москва, Россия

*e-mail: dkbel75@gmail.com

Поступила в редакцию 25.11.2019 г.

После доработки 02.03.2020 г.

Принята к публикации 17.03.2020 г.

Рассмотрены литературные данные по ударному сжатию компактных и пористых образцов ряда металлов – меди, олова, свинца, висмута, железа и никеля, и по использованию этих данных для расчета межчастичных потенциалов модели погруженного атома (ЕАМ). Адиабаты Гюгонио компактных металлов дают информацию для расчетов потенциалов ЕАМ, однако с увеличением пористости исходных образцов они становятся непригодными для этой цели из-за несогласованности с данными, полученными на компактных образцах. Рассмотрены возможные причины этой несогласованности.

Ключевые слова: ударное сжатие, пористые образцы, металлы, межчастичный потенциал, адиабаты Гюгонио

DOI: 10.31857/S0044453720100064

Как известно, совокупность данных по ударному сжатию компактного металла, находящегося в исходном состоянии при определенных условиях (с давлением p_1 и мольным объемом V_1), позволяет получить единственную ударную адиабату (адиабату Гюгонио). Она описывается уравнением [1, 2]:

$$\Delta U = (1/2)(p_1 + p_2)(V_1 - V_2), \quad (1)$$

где p_1 и p_2 – исходное давление перед фронтом ударной волны и давление позади фронта, V_1 и V_2 – мольные объемы металла перед фронтом волны и позади фронта, $\Delta U = U_2 - U_1$ – разность мольных энергий металла позади фронта волны и перед фронтом. На плоскости (V, p) ударная адиабата образует траекторию. Другие точки квадранта V, p недостижимы из той же самой исходной точки. Если в исходном состоянии металл находится в стандартном состоянии ($T = 298$ К, $p_1 = 1$ ат, $V_1 = V_0$ – стандартный мольный объем), то эту адиабату называют основной. Однако можно использовать в качестве исходного состояния металл с отличными от стандартных свойствами – исходно пористый, охлажденный, подогретый или жидкий. Тогда можно построить семейство ударных адиабат, исходящих из различных точек квадранта V, p и покрывающих более широкую область состояний [2]. Уравнение (1) остается справедливым и для пористых веществ [1, 2].

Первые работы по ударному сжатию металлов появились в 50-х годах XX века. Значительное

число работ было выполнено с применением исходно пористых образцов. Российские исследования в этом направлении проводились, начиная с 1958 г. и до последнего времени [3]. Зарубежные работы по сжатию пористых металлов публиковались с 1968 г по 1980 г. Степень исходной пористости описывают обычно коэффициентом $m = V_{00}/V_0$, где V_0 – стандартный мольный объем, а V_{00} – фактический исходный мольный объем. Для исходно пористого вещества $m > 1$. Судя по обширным материалам, приведенным на сайте [4], применялись коэффициенты m от 1 до 10–20. При ударном сжатии пористого вещества можно получить значительно более высокие температуры, чем при сжатии компактного металла.

Данные, полученные методом ударного сжатия, представляют интерес для расчетов уравнений состояния веществ при экстремально высоких давлениях и температурах, недостижимых в условиях статических экспериментов. Такие условия реализуются, например, при взрывах, а также в астрофизических объектах. Знание уравнений состояния позволяет сконструировать потенциалы межчастичного взаимодействия, используя которые можно получить полный набор свойств вещества [5, 6]. Это направление успешно развивается в последнее время. В связи с этим возникает необходимость анализа точности метода ударного сжатия и проверки согласованности данных, приведенных в большом количестве публикаций.

В настоящей работе проведено сравнение данных различных авторов и сделана попытка проверить, в какой степени близки к равновесию сильно сжатые состояния металла в зоне позади фронта ударной волны. Если равновесие в этой зоне достигается, то тогда при определенной плотности позади фронта энергия вещества должна однозначно зависеть от давления, несмотря на различия в исходных состояниях. Такую проверку можно провести на веществах с различной исходной пористостью.

Анализ совместимости данных ударного сжатия

С учетом принятых выше обозначений и обычного условия $p_1 \approx 0$ уравнение (1) запишется в виде:

$$U_2 - U_1 = 0.5pV_0(m - 1/Z), \quad (2)$$

где $Z = V_0/V$ относится к сжатой фазе позади фронта ударной волны. Будем учитывать, что при исходной температуре 298 К исходная мольная энергия вещества U_1 в выражении $\Delta U = U_2 - U_1$ очень мало зависит от пористости и отличается от энергии компактного металла при стандартных условиях U_{298}^0 на относительно небольшую энергию диспергирования.

При анализе всей совокупности данных следует учитывать, что:

1) уравнение (1) для ударной адиабаты $p(V)$ справедливо, если вещество позади фронта ударной волны находится в равновесном состоянии,

2) в этом случае его энергия и температура **однозначно** определяются его давлением и плотностью (мольным объемом),

3) две ударных адиабаты (2) с разными коэффициентами m не могут пересекаться на графике зависимости $p(V)$, иначе в точке пересечения будут возможны два состояния с различными значениями энергии, но с одинаковыми объемами и давлениями, что противоречит п. 2,

4) график зависимости $p(\Delta U)$ для множества исходных состояний при фиксированном объеме позади фронта волны (т.е. для набора параметров m при фиксированном Z) должен быть одно-однозначным (одно значение давления – одно значение ΔU).

Многочисленные результаты ударного сжатия многих металлов, полученные в целом ряде стран и лабораторий, собраны в базе данных [4]. Для анализа совместимости данных для какого-либо одного металла применимы описанные ниже методы.

Первый метод анализа данных по ударному сжатию. При сравнении результатов, полученных разными авторами, применим следующую методику. Весь интервал значений $Z = V_0/V$ в ударной

волне (позади фронта) разобьем на участки шириной 0.04. Выберем из базы данных [4] все результаты, относящиеся к определенному, достаточно узкому интервалу объемов вблизи V_x в сжатом состоянии. При фиксированных m и V_x уравнение (2) имеет единственное решение с давлением p_x и энергией U_x . Нанесем эту точку на график в координатах $\Delta U_x - p_x$. Каждая адиабата с новым значением m даст новую точку на этом графике. При выборе значения объема V_x из интервала значений $V_x \pm \Delta V$ каждая точка преобразуется в небольшой отрезок m – адиабаты. Затем значения ΔU_x и p_x для соответствующего интервала степеней сжатия нанесем на график. Если все опытные данные достаточно точны, то все точки должны образовать плавную кривую.

Рассмотрим ситуацию для случая меди. В базе данных [4] приведены результаты 706 опытов по ударному сжатию меди, опубликованные в 34 работах, при значениях коэффициента m от 1 до 10.034. На рис. 1 показана основная ударная адиабата компактной меди (при $m = 1.000$), построенная по экспериментальным данным [7–13].

Она хорошо описывается уравнением:

$$p, \text{ ГПа} = 7.8411 \times 10^2 Z^3 - 2.3436E \times 10^3 Z^2 + 2.5010 \times 10^3 Z - 9.4123 \times 10^2, \quad (3)$$

где $Z = V_0/V$. Здесь $V_0 = 7.116 \text{ см}^3/\text{моль}$. Основная масса данных относится к интервалу $Z < 1.6$. Визуальный разброс данных относительно невелик. Для лучшего представления о разбросе данных, полученных в различных работах, на рис. 2, линия 1 приведены параметры опытов для меди с различной исходной пористостью ($m = 2.97, 3.50, 4.00, 7.20$), в которых относительная плотность Z позади фронта волны заключалась в пределах 0.824–0.839 – всего 10 точек [9, 14, 15]. Все точки расположены на гладкой кривой с небольшим разбросом. Температура состояний возрастает слева направо.

Наклон графика на рис. 2 представляет собой производную $(dp/dU)_V$. Она равна 0.1092 при $\Delta U = 0$ и 0.08717 при $\Delta U = 2410 \text{ кДж/моль}$, и по ней можно оценить коэффициент Грюнайзена $\gamma = V(dp/dU)_V$. Этот коэффициент равен 0.932 при $\Delta U = 0$ и 0.745 при $\Delta U = 2400 \text{ кДж/моль}$. Однако следует иметь в виду, что интервалу энергий $0 < \Delta U < 2410 \text{ кДж/моль}$ отвечают температуры, далеко превосходящие 50000 К, так что оценка коэффициента Грюнайзена оказывается очень грубой.

На рис. 2, линия 2, приведены параметры опытов, в которых относительная плотность заключается в пределах 1.022–1.060 – всего 34 точки ($m = 1.00, 1.21, 1.22, 1.41, 1.47, 1.55, 1.98, 2.00, 3.00, 3.01$) [8, 9, 15–18]. Можно отметить три выброса: при $\Delta U = 85.15$ ($m = 1.555$ [9]), 350.2 ($m = 3.01$ [18])

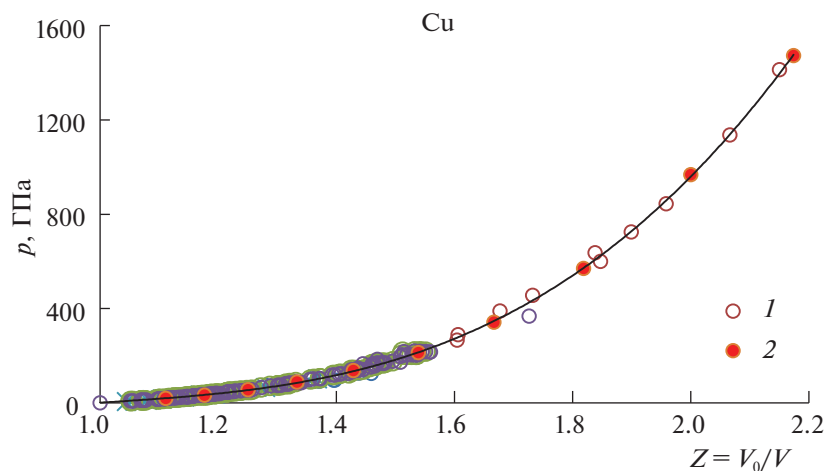


Рис. 1. Ударная адиабата компактной меди: 1 – данные [7–13], 2 – теоретическая адиабата [6, 14].

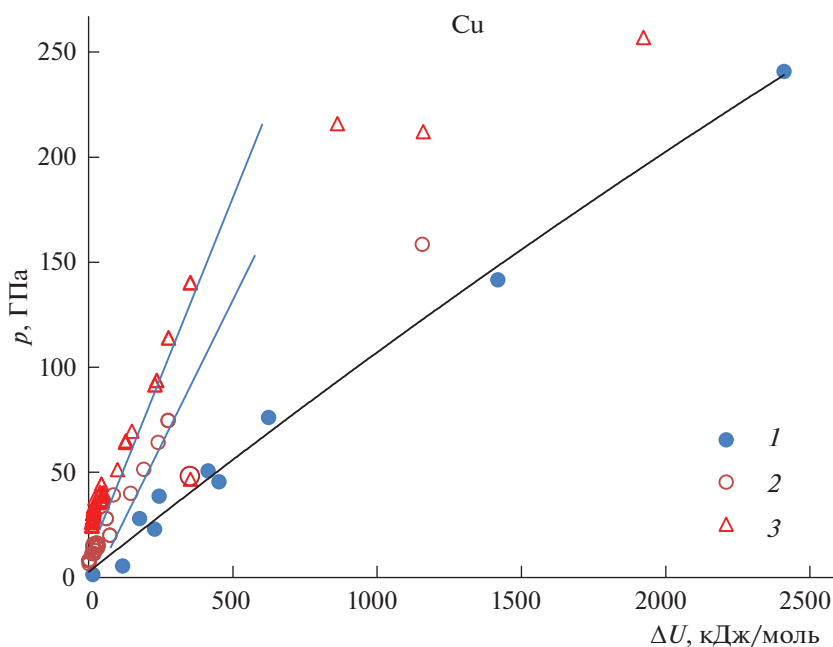


Рис. 2. Зависимости давления p , ГПа от ΔU , кДж/моль на ударных адиабатах компактной меди при $m = 1.000$ и $1.507 < Z < 1.536$.

и 1155 ($m = 3.007$ [16]) кДж/моль. Первые две из этих точек запрещены (пункт 4 – см. выше), поскольку у них есть двойники на основной линии 2, с которыми у них совпадают объемы и давление, но заметно отличается энергия. Третья точка также явно не на своем месте. Наклон прямой 2 на графике равен 0.2353, так что эффективный средний коэффициент Грюнайзена по всему интервалу равен ~ 1.6 .

На рис. 2, линия 3, приведены параметры опытов, в которых относительная плотность Z заключалась в пределах 1.14–1.18 – всего 77 точек ($m =$

$= 1.00, 1.13, 1.21, 1.22, 1.41, 1.55, 2.41, 2.98$) [8, 9, 15, 17, 19–21]. Одна из них (при давлении менее 50 ГПа), явно является выбросом, и так же не на месте расположены три точки при $\Delta U > 860$ кДж/моль. Все эти точки получены при сжатии пористых образцов с коэффициентами $m = 1.555$ [9], 2.000 [21], 2.41 [20], 2.97 [9], 2.98 [19].

По наклону линии 3 на рис. 2 (0.329 ГПа моль/кДж) можно рассчитать эффективный коэффициент Грюнайзена. Беря $Z = 1.160$, получаем среднюю величину $\gamma \sim 2.1$ в интервале давлений

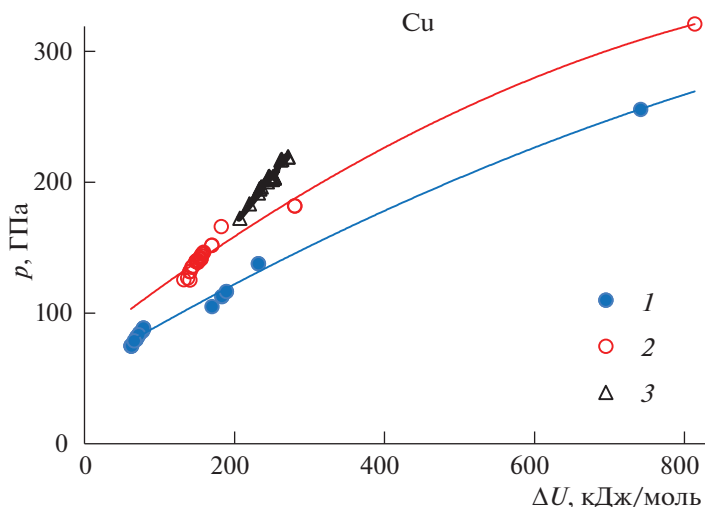


Рис. 3. Зависимости давления p , ГПа от ΔU , кДж/моль на ударных адиабатах компактной и пористой меди: 1 — $0.824 < Z < 0.839$, 2 — $1.022 < Z < 1.060$, 3 — $1.14 < Z < 1.18$.

до 150 ГПа. Все точки при $\Delta U > 500$ кДж/моль выглядят ошибочными.

На рис. 3, линия 1, приведены параметры опытов, в которых относительная плотность меди Z заключалась в пределах 1.301–1.335 — всего 31 точка ($m = 1.00, 1.22, 1.57$) [8, 9, 21]. Каждая компактная группа точек с повышенным наклоном относится к какой-нибудь одной ударной адиабате с одинаковой исходной пористостью. Участок графика при $\Delta U > 232$ кДж/моль не представителен (всего одна точка в конце графика). Если все точки аппроксимировать параболой, то эффективный коэффициент Грюнайзена равен ~ 1.77 в начале графика и 1.09 в конце, при $\Delta U = 700$ кДж/моль (и температуре $\sim 35\,000$ К).

На рис. 3, линия 2, приведены параметры опытов, в которых относительная плотность заключается в пределах 1.42–1.46 — всего 29 точек ($m = 1.00, 1.13, 1.41$) [8, 9, 15]. График аппроксимируется параболой. Эффективный коэффициент Грюнайзена равен 1.92 на левой границе интервала и 0.76 на правой границе. Две точки при $\Delta U > 700$ кДж/моль получены при $m = 1.57$ (линия 1 [15]) и $m = 1.411$ (линия 2 [21]).

На рис. 3, линия 3 показана по данным [4] выборка 26 ударных испытаний меди с коэффициентом пористости $m = 1$ при значениях Z от 1.507 до 1.536. Экспериментальные значения давления, относящиеся в данном случае к основной ударной адиабате, лежат в интервале шириной 47 ГПа (от 172.6 до 219.6 ГПа). Разброс давлений достигает ~ 5 ГПа.

При больших значениях Z в банке данных [4] представлено 78 записей экспериментов с медью, причем только в трех случаях степень пористости m отличалась от 1.00. В этом случае графики типа

изображенных на рис. 2 и рис. 3 описывают сегмент основной адиабаты, а не изохоры $V = \text{const}$, и выбирать для анализа совокупность опытов по ударному сжатию с одинаковыми значениями m не имеет смысла.

В итоге по этой схеме тестирования видно, что среди результатов ударного сжатия меди при значениях $m > 1.50$ довольно высока доля выпадов — четыре точки из шести на рис. 2. Оценки коэффициента Грюнайзена неточны, поскольку подразумевают усреднение по большим интервалам температуры, однако в случае меди в общем согласуются с аккуратными расчетами, использующими молекулярно-динамическое моделирование [6].

Далее можно провести аналогичные расчеты для никеля. На рис. 4, линия 1, приведены результаты опытов, в которых относительная плотность Z заключается в пределах от 0.945 до 0.978 — всего семь точек ($m = 2.00, 2.30, 2.70, 3.00$) [15, 16]. График аппроксимируется прямой линией с наклоном 0.1411. Отсюда эффективный коэффициент Грюнайзена равен ~ 0.97 во всем интервале температур (до $\sim 15\,000$ К [6]). Молекулярно-динамические расчеты дают значения γ в этом интервале от 1.05 до 0.66 [6]. Обе точки при $\Delta U > 3000$ кДж/моль получены при исходной пористости $m = 3.00$.

На рис. 4, линия 2, приведены параметры опытов, в которых относительная плотность Z заключается в пределах от 1.023 до 1.049 — всего 12 точек ($m = 1.11, 1.41, 2.00, 2.38$) [15, 18]. График аппроксимируется прямой линией с наклоном 0.2559. Отсюда средний эффективный коэффициент Грюнайзена (в интервале температур до $\sim 35\,000$ К) равен 1.6, что значительно выше молекулярно-динамической оценки (0.6–1.1 [6]). Имеются два выброса при $m = 1.41$ [15] и 2.38 [18].

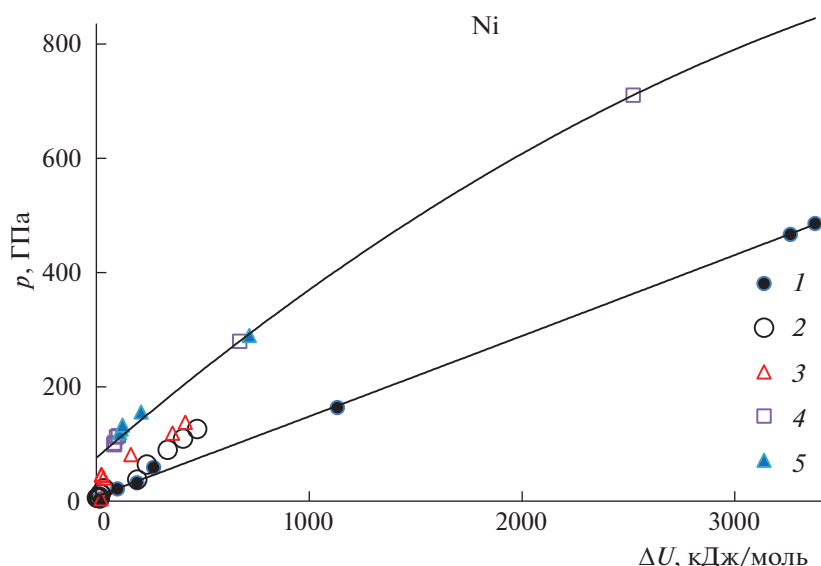


Рис. 4. Зависимости давления p , ГПа от ΔU , кДж/моль на ударных адиабатах компактного и пористого никеля: 1 – $0.945 < Z < 0.978$, 2 – $1.023 < Z < 1.049$, 3 – $1.145 < Z < 1.176$, 4 – $1.307 < Z < 1.339$, 5 – $1.344 < Z < 1.371$.

На рис. 4, линия 3, приведены параметры опытов, в которых относительная плотность Z заключается в пределах от 1.145 до 1.176 – всего семь точек ($m = 1.00, 1.108, 1.413, 1.717, 2.38$) [9, 13, 15, 18, 22]. На этом графике виден довольно сильный разброс. Точка с $m = 2.38$ [18] является выбросом. Без учета этой точки график аппроксимируется прямой линией. Наклон прямой равен 0.235. Отсюда эффективный коэффициент Грюнайзена равен 1.34. Молекулярно-динамические расчеты для интервала температур до 20000 К дают значения γ от 0.9 до 0.6 [6].

На рис. 4, линия 4, приведены результаты опытов, в которых относительная плотность Z заключается в пределах от 1.307 до 1.339 – всего восемь точек ($m = 1.00, 1.427, 1.744$) [9, 15, 23–25]. График аппроксимируется параболой. Наклон кривой равен 0.3212 в начале и 0.1826 в конце. Отсюда эффективный коэффициент Грюнайзена равен 1.61 в начале и 0.91 в конце. Точке при $\Delta U = 720$ кДж/моль соответствует температура выше 30000 К. Молекулярно-динамическая оценка для этого интервала дает значения γ от 1.0 до 0.7 [6]. Точка при $\Delta U > 2500$ кДж/моль получена при исходной пористости $m = 1.744$.

На рис. 4, линия 5, приведены результаты опытов, в которых относительная плотность заключается в пределах от 1.344 до 1.371 – всего 5 точек ($m = 1.00, 1.108, 1.430$) [9, 10, 13, 16, 25]. Эти результаты почти совпадают с предыдущими. График аппроксимируется параболой. Наклон кривой равен 0.3360 в начале и 0.2093 в конце. Отсюда эффективный коэффициент Грюнайзена равен 1.64 в начале и 1.02 в конце.

При больших значениях Z (17 записей) данные ударного сжатия получены, согласно банку [4], только при $m = 1.000$ и не дают возможности построить искомый график. Относительно точности точек при $\Delta U > 2500$ кДж/моль судить трудно из-за недостатка данных.

Итак, в случае никеля эффективные коэффициенты Грюнайзена, определенные по данным ударного сжатия исходно пористых образцов, заметно отличаются от результатов молекулярно-динамических расчетов [6].

Второй метод анализа результатов ударного сжатия заключается в расчете ударной адиабаты исходно пористого вещества с использованием таблиц значений энергии и давления $U(V, T)$ и $p(V, T)$, полученных обработкой данных по ударному сжатию компактного вещества. Метод был предложен в [6, 26, 27]. Необходимый для этих расчетов межчастичный потенциал определяется путем решения обратной задачи. Если потенциал взаимодействия атомов известен, то можно построить ударную адиабату следующим образом. С помощью метода молекулярной динамики строим набор моделей при различных плотностях и температурах и составляем две таблицы зависимости энергии и давления моделей от температуры и степени сжатия $Y = V/V_0$ (или $Z = 1/Y$). Расчетные значения энергии и давления меди, полученные методом МД с потенциалом из [6] с учетом электронных вкладов, приведены в табл. 1, 2 [6, 14]. Такие же данные для никеля приведены в табл. 3, 4 [6, 28]. Далее выбираем пробное значение степени сжатия Z_x в ударной волне и строим методом МД серию моделей при заданном объеме, но при различных температурах. Далее стро-

Таблица 1. Полная энергия U моделей меди, кДж/моль, $V = 7.116 \text{ см}^3/\text{моль}$. Потенциал из работ [5, 6, 14]

$T, \text{ К}$	$Y = V/V_0$							
	1.10	1.00	0.90	0.80	0.70	0.60	0.50	0.46
	U							
298	-329.62	-334.12	-328.35	-304.90	-246.79	-121.26	149.06	331.92
1000	-311.90	-316.53	-310.79	-287.18	-229.10	-103.54	166.70	349.52
1500	-290.57	-303.71	-298.02	-274.34	-216.32	-90.75	179.39	362.20
2000	-277.72	-290.43	-285.00	-261.33	-203.37	-77.84	192.19	374.98
3000	-253.15	-252.00	-257.67	-234.59	-176.99	-51.66	218.05	400.76
5000	-206.39	-202.42	-188.10	-156.27	-91.05	40.65	282.42	464.95
7000	-160.21	-154.07	-137.29	-102.35	-33.73	101.56	380.19	550.44
10000	-90.18	-81.74	-62.28	-23.87	49.42	189.44	473.90	661.46
20000	154.35	167.41	192.79	238.75	320.35	472.32	770.81	965.03

Примечание: закрашены ячейки с устойчивыми решетками ГЦК.

Таблица 2. Давление p моделей меди, ГПа. Потенциал из работ [5, 6, 14]

$T, \text{ К}$	$Y = V/V_0$							
	1.1	1.0	0.9	0.8	0.7	0.6	0.5	0.46
	p							
0	—	—	16.7	51.4	117.1	250.1	509.0	—
298	-9.43	1.84	20.19	54.20	120.4	254.4	548.3	753.0
1000	-0.02	6.60	25.33	59.48	125.5	260.0	554.6	759.3
1500	3.87	10.12	28.92	63.18	129.2	264.1	559.1	764.0
2000	7.29	13.77	32.51	66.87	132.9	268.1	563.6	768.5
3000	13.23	26.11	40.00	74.32	140.4	276.4	572.7	778.0
5000	22.97	37.38	60.48	99.23	170.0	311.9	597.3	802.5
7000	31.44	47.16	71.91	112.8	186.4	331.5	637.9	838.5
10000	42.95	60.37	87.25	131.1	208.1	358.5	671.5	883.6

им графики: а) функции $U(p)$ по уравнению (1), и б) зависимости энергии моделей с параметром Z_x от давления при различных температурах (см. рис. 5). Точка пересечения этих линий дает одну точку на ударной адиабате при значении Z_x (или Y_x). Затем повторяем это построение для других значений Z . В итоге будет построена ударная адиабата. Ниже будем называть ее *теоретической адиабатой*.

В случае меди таблицы $U(V, T)$ и $p(V, T)$ (табл. 1 и 2) были построены по данным метода МД с потенциалом ЕАМ из работ [5, 6, 14]. Очевидно, теоретическая ударная адиабата должна хорошо согласоваться с исходными данными по ударному сжатию. Прекрасное совпадение для меди в случае $m = 1$ видно из рис. 1, где использованы данные табл. 1, 2, а также результаты опытов по ударному сжатию исходно компактных образцов [7–13]. Расчеты теоретической ударной адиабаты ис-

ходно пористых образцов проводятся путем простой замены параметра $m = 1$ в уравнении (2) на другую величину $m > 1$. На рис. 6 показаны теоретические ударные адиабаты меди при $m = 1.000$, 1.412 и 2.000 в сравнении с данными опыта. Здесь также получено хорошее согласие расчета с экспериментом, даже при $m = 2.000$ [6].

В случае висмута хорошее согласие опыта с теоретической адиабатой сохраняется вплоть до $m = 1.486$ [6]. На рис. 7 показаны ударные адиабаты олова при значениях степени пористости $m = 1.000$ и 1.807, рассчитанные по данным метода МД с потенциалом ЕАМ [6, 26]. Для этого металла данные опыта хорошо согласуются с теоретическими адиабатами при обоих значениях m .

Для компактного никеля с потенциалом ЕАМ работы [28] согласие теоретической адиабаты с опытом также очень хорошее (рис. 8). Однако уже при $m = 1.413$ и 1.717 получается значительное рас-

Таблица 3. Энергия моделей никеля с потенциалом ЕАМ-В [28] и с учетом электронных вкладов E_{eT} , кДж/моль

T, К	Степень сжатия $Z = V_0/V$									E_{eT} кДж/моль
	1.0000	1.1111	1.1765	1.2500	1.3333	1.4286	1.5385	1.6667	1.8182	
	$U + E_{eT}$									
298	-420.57	-410.31	-396.56	-375.04	-343.52	-304.46	-239.94	-134.05	36.01	0.00
1000	-400.34	-390.34	-376.73	-355.35	-324.01	-284.72	-220.18	-114.36	55.63	2.06
2000	-366.57	-358.86	-345.97	-325.4	-294.73	-254.69	-190.29	-84.74	84.94	6.29
3000	-323.76	-311.47	-298.05	-276.94	-262.79	-220.51	-158.3	-53.17	116.15	12.10
5000	-261.31	-246.17	-231	-208.45	-175.95	-129.82	-63.52	43.1	186.03	28.55
7000	-196.01	-178.71	-162.24	-138.45	-104.63	-56.88	10.42	118.18	289.44	51.93
10000	-95.7	-75.57	-57.28	-31.89	3.05	52.55	121.82	231.21	404.74	93.23
15000	79.4	103.24	123.92	151.86	189.44	240.57	344.71	424.74	600.83	176.14
20000	266.13	294.48	315.73	345.63	384.91	438.41	513.15	627.43	805.95	275.31
25000	468.73	498.45	521.86	553.51	595.14	650.35	726.82	843.73	1024.0	392.27

Примечание. Ячейки с устойчивыми фазами ГЦК или ОЦК закрашены.

Таблица 4. Давление p моделей никеля с потенциалом ЕАМ-В [28], ГПа

T, К	Степень сжатия $Z = V_0/V$									
	1.0000	1.1111	1.1765	1.2500	1.3333	1.4286	1.5385	1.6667	1.8182	
	p									
298	3.08	32.35	53.19	79.82	114.7	160.7	246.9	406.3	641.7	
1000	6.44	34.88	55.5	82.26	117.5	164.7	250.8	409.8	645.5	
2000	13.13	39.52	59.85	86.69	122.6	170.5	256.5	415.2	651.6	
3000	23.86	50.57	70.56	97.38	128.3	177.1	262.8	421.1	658.1	
5000	33.76	61.52	82.22	109.57	146.3	196.8	284.6	442.5	672.5	
7000	41.86	70.66	91.95	119.9	157.3	209.2	298.4	456.5	695.2	
10000	52.47	82.71	104.9	133.8	171.9	225.8	317.2	475.7	715.8	
15000	67.75	99.93	123.5	153.9	193.9	250.4	344.7	504.5	746.6	
20000	81.21	115.8	140.1	171.8	213.3	272.7	369.7	530.6	774.9	
25000	93.92	129.7	155.3	188.3	231.7	293.7	392.9	555.0	801.2	

Примечание: Ячейки с устойчивыми фазами ГЦК или ОЦК закрашены.

хождение экспериментального давления никеля с расчетными данными (рис. 8). Здесь наблюдается систематическое завышение давления на адиабате пористого никеля над теоретической адиабатой при всех величинах давления свыше 30 ГПа. При значениях пористости m от 1.427 до 2.380 в пяти случаях из девяти наблюдается завышение давления над теоретическим в 1.5–4 раза, и в одном случае – занижение в 32 раза.

На рис. 9 показаны ударные адиабаты железа при значениях степени пористости $m = 1.002$, 1.129 и 1.660, рассчитанные по данным метода МД с потенциалом ЕАМ-2 [6, 30]. При $m = 1.002$, 1.129 и 1.351 данные опыта хорошо согласуются с теоретической адиабатой. При увеличении m появляются расхождения, и при $m = 1.660$ экспери-

ментальная адиабата располагается гораздо выше теоретической. С увеличением пористости усиливается разброс экспериментальных данных [15]. Например, при $m = 2.910$ давление железа на адиабате немонотонно зависит от степени сжатия.

На рис. 10 показаны ударные адиабаты свинца при значениях степени пористости $m = 1.000$, 1.351 и 2.409, рассчитанные с учетом данных метода МД с потенциалом ЕАМ из [6, 27]. При $m = 1$ данные опыта хорошо согласуются с теоретической адиабатой. При увеличении m появляются расхождения, и экспериментальные значения давления становятся выше, чем на теоретических адиабатах, причем с увеличением давления это

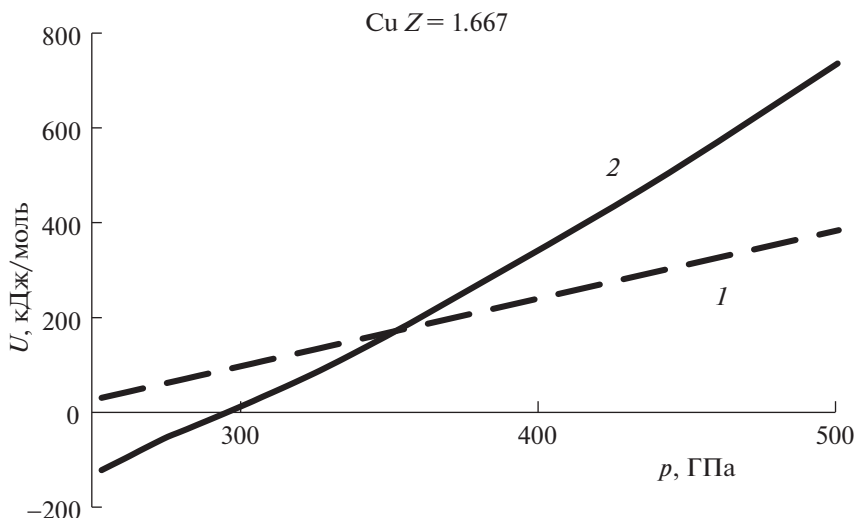


Рис. 5. Расчет точки на адиабате Гюгонио компактной меди при $Z_x = 1.667$. Прямая 1 – график уравнения (2), 2 – зависимость энергии от давления молекулярно-динамических моделей меди при нагревании вдоль изохоры $Z_x = 1.667$. Точка пересечения определяет точку на ударной адиабате.

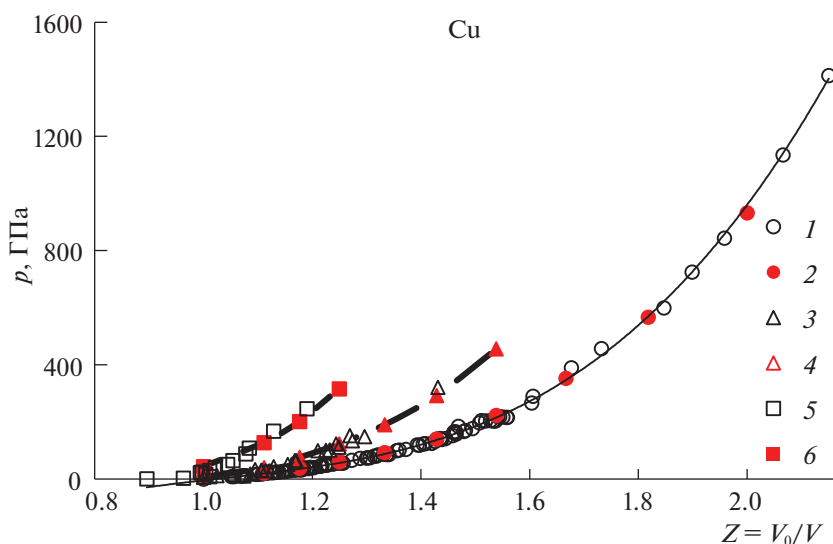


Рис. 6. Ударные адиабаты компактной и пористой меди, 1 – данные [9, 11] при $m = 1.000$, 2 – теоретическая адиабата при $m = 1.000$, 3 – данные [9, 15] при $m = 1.412$, 4 – теоретическая адиабата при $m = 1.412$, 5 – данные [15] при $m = 2.000$, 6 – теоретическая адиабата при $m = 2.000$.

завышение усиливается. Аналогичная картина наблюдается и для цинка [6].

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Оценим эти результаты с точки зрения возможности получить сведения о межчастичном взаимодействии из исследований ударного сжатия металлов. Ударное сжатие компактных образцов дает в основном согласованный материал, позволяющий извлечь потенциал межчастичного взаимодействия (например, потенциал ЕАМ) пу-

тем соответствующей обработки [5, 6]. Приведенный выше анализ показывает, что при увеличении степени исходной пористости выше некоторого предела результаты ударного сжатия пористых образцов в значительной степени расходятся с теоретическими адиабатами сжатия.

Эти расхождения бывают настолько велики, что исключают возможность расчета межчастичных потенциалов на основе опытных данных для пористых образцов. Некоторые причины такого положения обсуждаются в [6]. Возможно, основные из них – это неустраняемая неоднородность

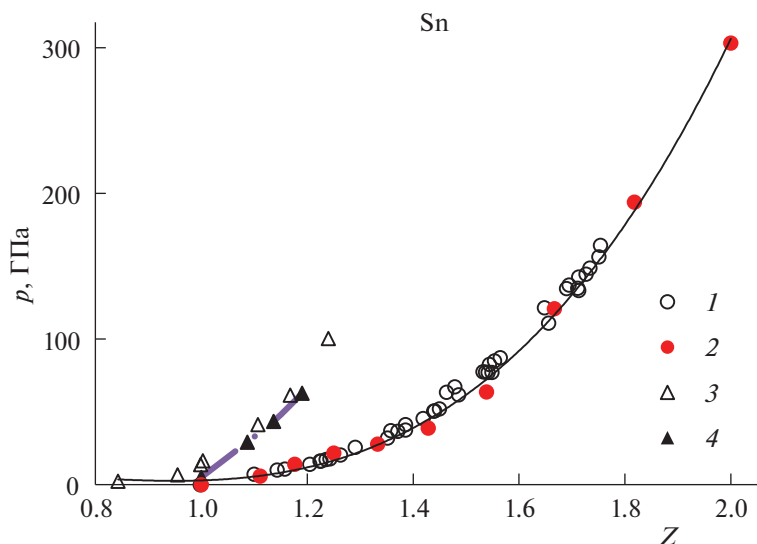


Рис. 7. Ударные адиабаты компактного и пористого олова, 1 – данные при $m = 1.002$ [9], 2 – теоретическая адиабата при $m = 1.002$ [6], 3 – данные при $m = 1.807$ [29], 4 – теоретическая адиабата при $m = 1.807$.

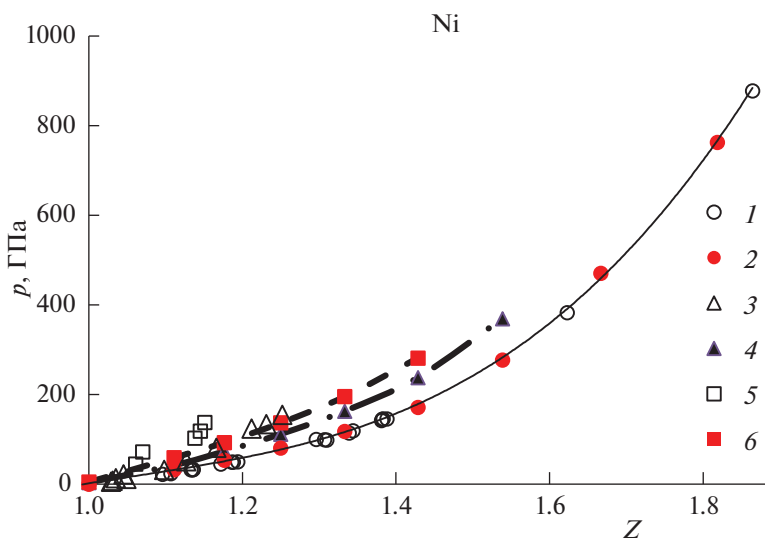


Рис. 8. Ударные адиабаты компактного и пористого никеля, 1 – данные при $m = 1.000$ [9, 10], 2 – теоретическая адиабата при $m = 1.000$ [6], 3 – данные при $m = 1.413$ [15], 4 – теоретическая адиабата при $m = 1.413$ [6], 5 – данные при $m = 1.717$ [15], 6 – теоретическая адиабата при $m = 1.717$.

пористого вещества, сложность подготовки исходных образцов и отклонение от состояния термодинамического равновесия в области позади фронта ударной волны.

Серьезные проблемы в случае ударного сжатия могут возникнуть в случае нагревания до высоких температур, когда из-за изменения характера заполнения электронных уровней наблюдались бы заметные изменения межчастичных потенциалов. Этот эффект должен быть более заметным в случае переходных металлов. Например, в случае простого металла – алюминия – число делокали-

зованных (“свободных”) электронов остается равным 3 эл/атом даже при нагревании до 10^5 К. Однако в случае золота оно увеличивается от 2.4 при 0 К до 4.25 при 10^5 К, а в случае никеля – от 1.4 при 0 К до 2.9 при 10^5 К [32]. Очевидно, при этом уменьшается число локализованных электронов, определяющее эффективный размер иона и, соответственно, должен измениться межчастичный потенциал. Соответствующие оценки пока не проводились.

В табл. 5 приведены температуры на теоретических адиабатах, рассчитанные для максималь-

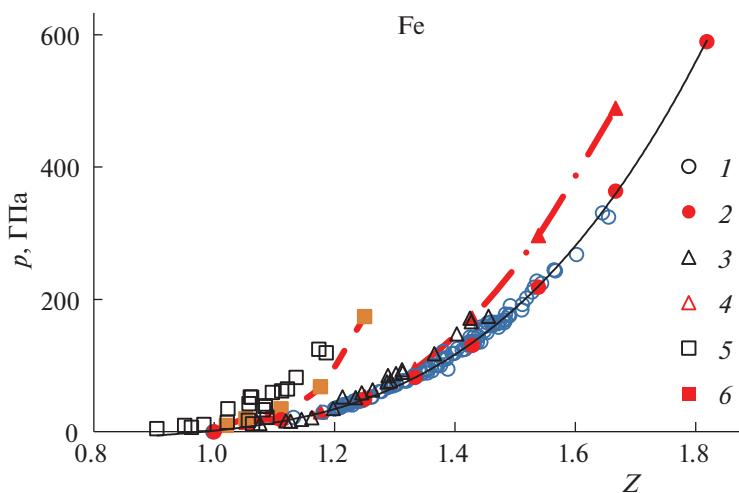


Рис. 9. Ударные адиабаты компактного и пористого железа, 1 – данные при $m = 1.002$ [9], 2 – теоретическая адиабата при $m = 1.002$ [6], 3 – данные при $m = 1.129$ [9], 4 – теоретическая адиабата при $m = 1.129$ [6], 5 – данные при $m = 1.660$ [9], 6 – теоретическая адиабата при $m = 1.660$.

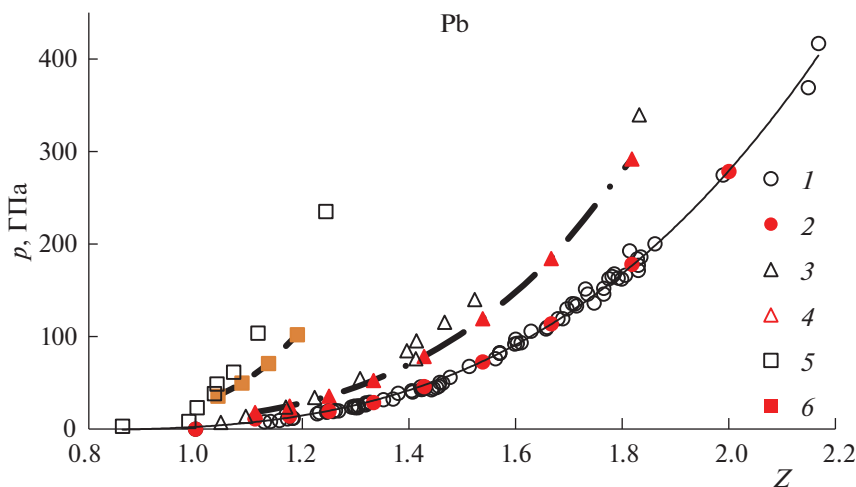


Рис. 10. Ударные адиабаты компактного и пористого свинца, 1 – данные при $m = 1.000$ [9, 31], 2 – теоретическая адиабата при $m = 1.000$ [6], 3 – данные при $m = 1.351$ [15], 4 – теоретическая адиабата при $m = 1.351$ [6], 5 – данные при $m = 2.409$ [15], 6 – теоретическая адиабата при $m = 2.409$.

ных степеней сжатия рассмотренных выше металлов. Эти температуры находятся в пределах 20000–40000 К и в принципе могут быть причиной изменений межчастичных потенциалов. Однако отклонения ударных адиабат пористых образцов от теоретических адиабат начинаются уже при не слишком высоких температурах, когда изменения степеней заполнения электронных состояний еще невелики (рис. 6, 8). Поэтому отклонения реальных ударных адиабат от теоретических связаны, скорее всего, с методическими проблемами подготовки пористых образцов или с неравновесностью сжатой области позади фронта ударной волны. Отсюда следует, что результаты опытов с ударным сжатием пористых образцов

непригодны для расчетов межчастичных потенциалов.

Наконец, следует отметить еще одну существенную причину расхождений с теоретическими расчетами ударных адиабат методом, использующим потенциалы ЕАМ. Дело в том, что потенциал ЕАМ вообще с трудом справляется с предсказанием температурных зависимостей свойств вещества [33]. Единственный инструмент для этой цели, заложенный в ЕАМ, это – зависимость от плотности металла эффективной электронной плотности, фигурирующей в схеме ЕАМ [34]. В частности, это свойство потенциала приводит к различиям потенциалов погружения ЕАМ при их расчете 1) по форме ударной адиабата

Таблица 5. Расчетные температуры на теоретических адиабатах

Металл	m	Z	T, K	Металл	m	Z	T, K
Cu	1.000	2.000	39000	Fe	1.002	1.818	26490
	1.413	1.538	38680		1.129	1.667	31470
	1.555	1.428	37110		1.316	1.428	21830
	2.000	1.176	30660		1.660	1.125	23980
Ni	1.000	1.818	17810	Pb	1.000	2.000	24590
	1.108	1.667	15070		1.351	1.667	29840
	1.413	1.538	33270		1.671	1.413	27510
	1.717	1.429	22130		2.409	1.190	37230

ты и 2) по функции “холодного давления” при статическом сжатии [33].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика сплошных сред, Гостехиздат, 1954.
2. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Изд-во “НАУКА”, 1966.
3. Фортон В.Е., Ломоносов И.В. // УФН. 2014. Т. 184. № 3. С. 231.
4. Данные на сайте: www.ihed.ras.ru/rusbank/
5. Белашченко Д.К. // УФН. 2013. Т. 183. № 12. С. 1281.
6. Belashchenko D.K. Liquid Metals. From Atomistic Potentials to the Properties, Shock Compression, Earth's Core and Nanoclusters. Ed. Nova Science Publishers. 2018.
7. van Thiel M. (Ed.). Compendium of shock wave data. Livermore: Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-50108, 1977, p. 130.
8. van Thiel M. (Ed.). Compendium of shock wave data. Livermore: Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-50108, 1977, p. 142.
9. Marsh S.P. (Ed.). LASL Shock Hugoniot Data. Univ. California Press, Berkeley, 1980.
10. Альтшуллер Л.В., Баканова А.А., Дудолодов И.П. и др. // ПМТФ. 1981. № 2. С. 3.
11. Глушак Б.Л., Жарков А.П., Жерноклетов М.В. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. С. 1301.
12. Жугин Ю.Н., Крупников К.К., Овечкин Н.А. и др. // Физ. Земли. 1994. Т. 10. С. 16.
13. Медведев А.Б., Трунин Р.Ф. // УФН. 2012. Т. 182. № 8. С. 829.
14. Белашченко Д.К. // Неорган. материалы. 2013. Т. 49. № 5. С. 473.
15. Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Сутолов Ю.Н. и др. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 9. С. 1024.
16. Корнер С.Б., Фунтиков А.И., Урлин В.Д., Колесникова А.Н. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 686.
17. Voade R.R. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. P. 5693.
18. Алексеев Ю.Л., Ратников Б.П., Рыбаков А.П. // ПМТФ. 1971. Т. 2. С. 101.
19. Зубарев В.Н., Подурец М.А., Попов Л.В. и др. В Сб. “Поведение веществ под воздействием сильных ударных волн”. Т. 4. РФЯЦ-ВНИИЭФ. 1978. С. 76.
20. Альтшуллер Л.В., Бушман А.В., Жерноклетов М.В. и др. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. С. 741.
21. Трунин Р.Ф., Медведев А.Б., Фунтиков А.И. и др. // Там же. 1989. Т. 95. С. 631.
22. Walsh J.M., Rice M.H., McQueen R.G., Yarger F.L. // Phys. Rev. 1957. V. 108. P. 196.
23. McQueen R.G., Marsh S.P. // J. Appl. Phys. 1960. V. 31. P. 1253.
24. Альтшуллер Л.В., Баканова А.А., Трунин Р.Ф. // ЖЭТФ. 1962. V. 42. P. 91.
25. Isbell W.H., Shipman F.H., Jones A.H. Hugoniot equation of state measurements for eleven materials to five megabars // General Motors Corp., Mat. Sci. Lab. Report MSL-68-13, 1968.
26. Белашченко Д.К. // ТВТ. 2017. Т. 55. № 1. С. 51.
27. Белашченко Д.К. // Там же. 2017. Т. 55. № 3. С. 386.
28. Белашченко Д.К. // Там же. 2020. Т. 58. № 1. С. 61.
29. Гударенко Л.Ф., Гущина О.Н., Жерноклетов М.В. и др. // Там же. 2000. Т. 38. № 3. С. 437.
30. Белашченко Д.К., Островский О.И. // Журн. физ. химии. 2011. Т. 85. № 6. С. 1063.
31. Альтшуллер Л.В., Чекин Б.С. Метрология импульсных давлений. В сб.: “Доклады I Всесоюзного симпозиума по импульсным давлениям”. М.: ВНИИФТРИ. 1974. С. 5–22.
32. Bévilion E., Colombier J.P., Recoules V., Stoian R. // Phys. Rev. B. 2014. V. 89. 115117.
33. Белашченко Д.К. // УФН. 2020. В печати.
34. Daw M.S., Baskes M.I. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. № 12. P. 6443.