

СЖИМАЕМОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ДЕЙТЕРИЯ И ГЕЛИЯ ДО 20 ТПа

М. А. Мочалов^{a,d}, Р. И. Илькаев^a, **В. Е. Фортгов**^b, С. В. Ерунов^{a,d}, В. А. Аринин^a,
 А. О. Бликов^{a,d*}, В. А. Комраков^a, И. П. Максимкин^a, В. А. Огородников^{a,d},
 А. В. Рыжков^a, В. К. Грязнов^c, И. Л. Иосилевский^b, П. Р. Левашов^b,
 Я. С. Лавриненко^b, И. В. Морозов^b, Д. В. Минаков^b,
 М. А. Парамонов^b, А. В. Шутков^c

^a Российский федеральный ядерный центр –
 Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
 607188, Саров, Нижегородская обл., Россия

^b Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
 125412, Москва, Россия

^c Институт проблем химической физики Российской академии наук
 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^d Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева
 603155, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 23 июня 2021 г.,
 после переработки 11 июля 2021 г.
 Принята к публикации 12 июля 2021 г.

Представлены экспериментальные результаты по сжимаемости сильнонеидеальной вырожденной плазмы дейтерия и гелия, квазиизэнтропически сжатой до давлений $P \sim 20$ ТПа в устройствах сферической геометрии. Траектории движения металлических оболочек, сжимающих плазму, регистрировались с помощью мощных импульсных источников рентгеновского излучения (бетатронов) с граничной энергией электронов 60 МэВ. Впервые в экспериментах в качестве источника рентгеновского излучения использован сильноточный ускоритель с просвечивающей способностью объектов с эквивалентной толщиной 250 мм свинца. Значения плотностей плазмы до $\rho \approx 14$ г/см³ определены по измеренной величине радиуса оболочки в момент ее «остановки». Давление сжатой плазмы получено на основе газодинамических расчетов, учитывающих реальные характеристики экспериментальных устройств.

DOI: 10.31857/S0044451021110122

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе показаны возможности экспериментальной физики высоких плотностей энергии в области генерации экстремальных состояний вещества, типичных для ряда астрофизических объектов во Вселенной, в лабораторных условиях. С использованием метода квазиизэнтропического сжатия в течение 2007–2020 годов в РФЯЦ-ВНИИЭФ была исследована сжимаемость неидеальной плаз-

мы дейтерия и гелия в диапазоне давлений до 12 ТПа [1–14]. В новых экспериментах, проведенных в РФЯЦ-ВНИИЭФ и описанных в данной работе, измерено сжатие неидеальной плазмы дейтерия и гелия до плотности 14 г/см³ давлением до 20 ТПа (200 млн. атмосфер).

Дополнительно проведен новый эксперимент в области давлений $P \approx 5.5$ ТПа, уточняющий положение точки МБ4 из работ [4, 5].

2. ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для изучения сжимаемости неидеальной плазмы газов в области давлений мегабарного диапазо-

* E-mail: mcleodjr@mail.ru

на использован динамический метод создания высоких давлений под действием энергии мощных ударных волн. Для достижения давлений указанного диапазона в РФЯЦ-ВНИИЭФ разработаны устройства цилиндрической и сферической геометрии [1–14]. Сжатие газа и образующейся плазмы в таких устройствах осуществляется системой ударных волн, циркулирующих в ее объеме, и под действием стальных оболочек, сходящихся к центру. Этот процесс получил название квазиизэнтропического, так как после прохождения первой ударной волны темп роста температуры плазмы при дальнейшем сжатии существенно замедляется. В конечном итоге, при возрастании давления внутри исследуемого вещества, сжимающая его оболочка останавливается (момент «остановки»), а затем разлетается. Целью экспериментов является регистрация траектории $R(t)$ движения оболочки экспериментального устройства и определение ее размера в момент остановки, когда достигается максимальное сжатие исследуемого вещества. На рис. 1 приведена схема эксперимента на рентгенографическом комплексе РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Экспериментальное устройство 1 размещается между двумя бетонными сооружениями 2, в которых находятся источники рентгеновского излучения. В левом (на рис. 1а) размещены два безжелезных импульсных бетатрона 3 БИМ234.3000 [15] с граничной энергией электронов 60 МэВ, работающих в режиме последовательной генерации трех импульсов рентгеновского излучения длительностью 150–180 нс. Использование бетатронов в таком режиме генерации позволяет просвечивать объекты с массовой толщиной до 230 г/см^2 , что эквивалентно толщине до 200 мм свинца.

В опытах использовалась оптико-электронная система детектирования 4, которая активируется синхронно с импульсами бетатрона. В качестве преобразователей рентгеновского излучения в видимое в данной системе использовались монокристаллы йодистого натрия и силикат лютеция. Для устранения влияния рассеянного излучения на высокочувствительные детекторы 4 размер поля регистрации в каждой из двух проекций ограничивается свинцовыми коллиматорами 5. Для защиты бетатронов 3 и оптико-электронных регистраторов рентгеновского излучения 4 применены алюминиевые конусы 6.

Ожидаемая в экспериментах плотность сжатой плазмы оценивалась величиной 14 г/см^3 . Для надежного просвечивания объема с плазмой такой плотности впервые был использован линейный индукционный ускоритель 7 ЛИУ-Р-Т [16], располо-

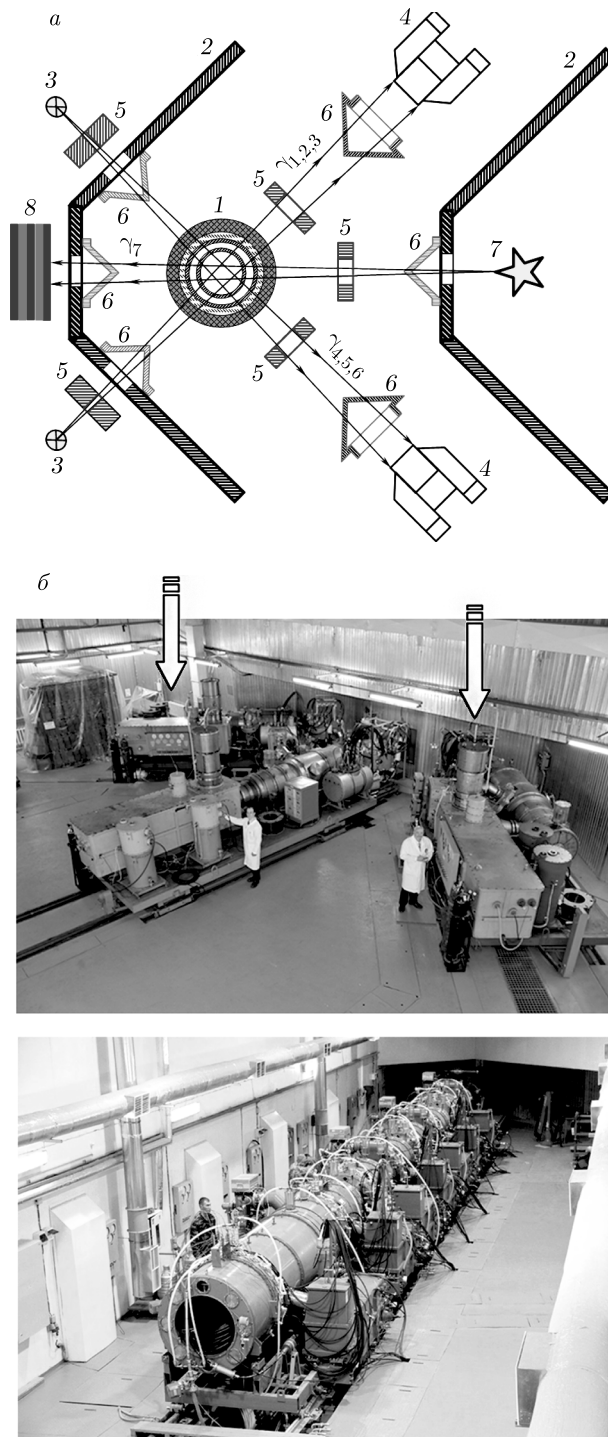


Рис. 1. (В цвете онлайн) а) Схема эксперимента: 1 — экспериментальное устройство; 2 — защитные сооружения; 3 — источники излучения (бетатроны); 4 — детекторы; 5 — коллиматоры (Pb); 6 — конусы (Al); 7 — линейный сильноточный ускоритель ЛИУ-Р-Т; 8 — набор фотохромных экранов. б) Общий вид зала с расположенными бетатронами (вверху; в эксперименте использовали две установки, которые отмечены стрелками) и ЛИУ-Р-Т (внизу)

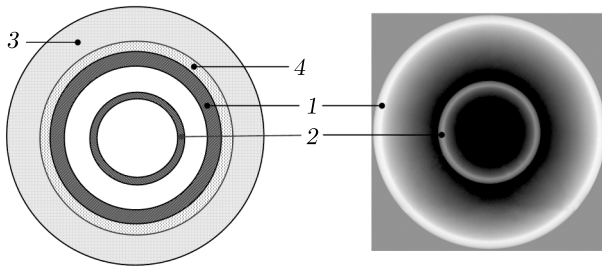


Рис. 2. (В цвете онлайн) Двухкаскадное сферическое экспериментальное устройство: слева — схема конструкции; справа — рентгенограмма устройства в исходном состоянии (1 — внешняя оболочка Fe1, 2 — внутренняя оболочка Fe2, 3 — ВВ, 4 — оргстекло)

женный в правом (рис. 1а) сооружении 2 со следующими техническими характеристиками: граничная энергия электронов 12 МэВ, ток пучка до 20 кА, длительность импульса излучения не более 50 нс, доза излучения на 1 м от мишени до 300 Р. Использование ЛИУ-Р-Т в оптимальном режиме позволяет просвечивать объекты с массовой толщиной до 300 г/см, что эквивалентно толщине 250 мм свинца. В качестве регистратора рентгеновского излучения ЛИУ-Р-Т в эксперименте был использован набор из десяти плотно сжатых фотохромных экранов 8 на основе галогенида бария, активированного европием (ADC-экраны).

Основу экспериментального устройства (рис. 2) составляет заполненная газом сферическая камера, состоящая из двух оболочек, 1 и 2, изготовленных из высокопрочной стали методом пайки из двух полусфер каждая [17].

Для заполнения экспериментального устройства нерадиоактивными изотопами водорода использовалась система напуска, основу которой составляют термодесорбционные источники [18]. Камеры заполнялись гелием с помощью термокомпрессора.

Величина давления газов в процессе заполнения измерялась датчиком S-10 фирмы WIKA (класс точности 0.25). Начальная температура контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, расположенной внутри трубопровода, использованного для напуска газов. Давление газа в полостях оболочек 1 и 2 (см. рис. 2) было одинаковым.

Начальные параметры газов на момент подрыва экспериментальных устройств приведены в табл. 1. Начальная плотность дейтерия рассчитана с использованием справочных данных [19]. Для определения начальной плотности гелия использовали табличные данные [20].

Таблица 1. Начальные параметры газов в экспериментах

Начальное состояние газов					
№	Газ	P_0 , ГПа	t , °С	ρ_0 , г/см ³	R_0 , мм
1	Дейтерий	0.01831	−9.2	0.03	29.5
2	Гелий	0.01862	−0.55	0.03	29.5
3	Дейтерий	0.02587	25.5	0.036	40

Примечание: R_0 — начальный радиус внутренней границы оболочки 2 (см. рис. 2), P_0 и T_0 — начальные давление и температура газов, ρ_0 — начальная плотность.

Для сжатия газов в экспериментах № 1 и № 2 использованы заряды взрывчатого вещества (ВВ) (3 на рис. 2) с массой 85 кг в тротиловом эквиваленте; масса ВВ в опыте № 3, уточняющем положение точки МБ4 из работ [4,5], составляла 55 кг тротила. Также в этом экспериментальном устройстве отсутствует оболочка из оргстекла.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Для тестирования нового экспериментального устройства, использованного в экспериментах № 1 и № 2, в начальной фазе работы, когда влиянием газа можно пренебречь, был проведен предварительный газодинамический опыт с полусферическим макетом, моделирующим геометрию конструкции и технологию эксперимента. Конструкция полусферического макета (рис. 3), использованного в газодинамическом опыте, аналогична описанной в работах [9–11]. В эксперименте использовали следующие методики: электроконтактную для регистрации движения ударной волны по оргстеклу (датчики располагали на двух уровнях, $K1$ и $K2$); рентгенографическую для регистрации движения оболочек; гетеродин-интерферометрическую с PDV-датчиками [21] для измерения скорости полета стальных оболочек (8 датчиков). Результаты проведенного опыта представлены на рис. 3.

Характерные экспериментальные рентгенограммы, зарегистрированные в экспериментах с дейтерием (опыт № 1) и гелием (опыт № 2), приведены на рис. 4 и 5. Там же показаны результаты трассировки внутренних границ оболочек экспериментальных устройств.

Для трассировки границ сферических оболочек, как и в работах [1–13], применен функциональный

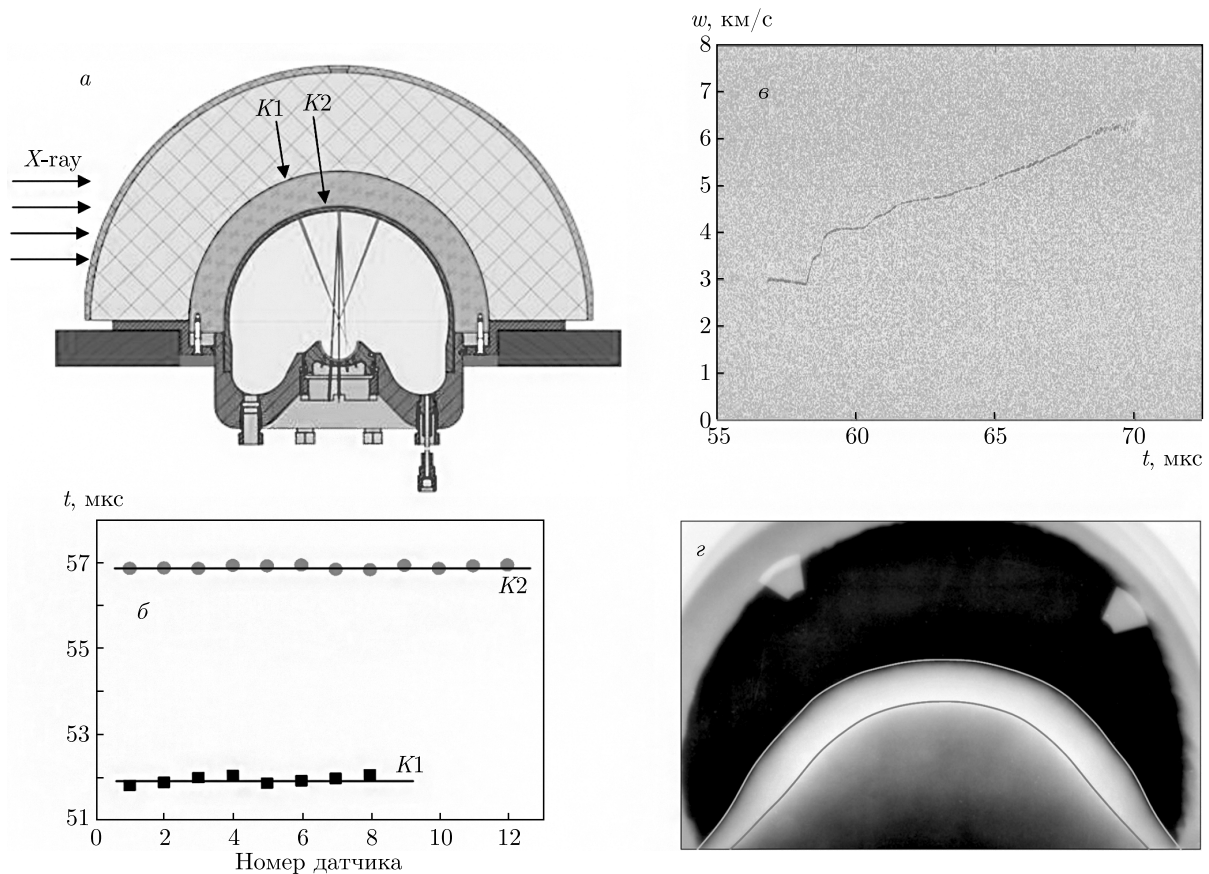


Рис. 3. (В цвете онлайн) Экспериментальный полусферический макет (а) и результаты опыта: данные электроконтактных датчиков (б); растрограмма с PDV-датчика [21] (в); рентгенограмма оболочки в момент $t = 66.81$ мкс (г)

метод [22], в основе которого лежит использование априорной информации о функции плотности по чернению фотоматериала в окрестности протяженных границ. Сущность этого метода — экстраполяция функций, лежащих слева и справа от границы, с целью нахождения точки их пересечения, которая и принимается за координату границы.

С учетом сохранения массы сжатого вещества его плотность вычисляется из выражения

$$\rho = \rho_0 (R_0 / R_{min})^n, \quad (1)$$

где ρ_0 — начальная плотность газа, R_0 и R_{min} — внутренние радиусы оболочки соответственно в исходном состоянии и в момент ее остановки, $n = 3$ для сферической геометрии.

Расчет характеристик экспериментальных устройств выполнен по одномерной газодинамической программе [23], предназначенной для численного моделирования неустановившихся движений сплошной среды, протестированной по экспериментальным данным, полученным в России и

за рубежом. В газодинамических расчетах использовали уравнения состояния (УРС) материалов, введенные в газодинамический расчетный комплекс РФЯЦ-ВНИИЭФ, которые неоднократно приводились в работах [1–13]. Для описания свойств дейтерия было использовано УРС из работы [24]. В расчетах гелия использовалось УРС в табличной форме, разработанное Хрустальевым на основе модифицированной модели сжимаемого коволюма [24–26], в которой учитывались результаты расчетов термодинамических свойств жидкости, выполненных методом Монте-Карло, с обратным степенным потенциалом взаимодействия между частицами.

Полученные в экспериментах $R(t)$ -данные по сжимаемости плазмы дейтерия и гелия приведены на рис. 6 и 7 вместе с результатами выполненных газодинамических расчетов. На тех же графиках нанесены и экспериментальные результаты, полученные в модельном полусферическом эксперименте и использованные для тестирования расчетов. На рис. 6 и 7 видно, что газодинамические расчеты с помощью

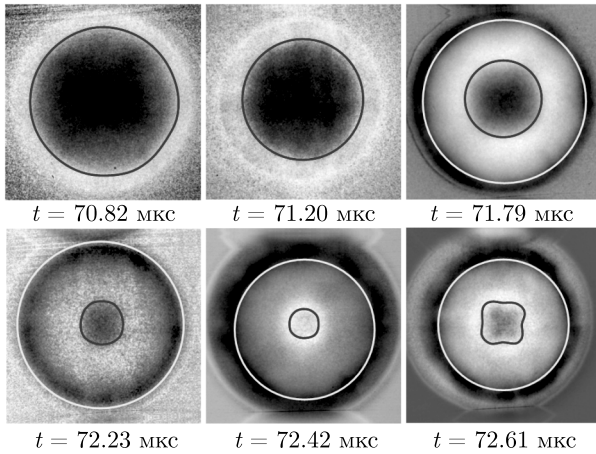


Рис. 4. (В цвете онлайн) Рентгенограммы сферической полости со сжатой плазмой дейтерия: темная окружность — полость сжатой плазмы, светлая окружность — внешняя граница внутренней оболочки 2 (см. рис. 2)

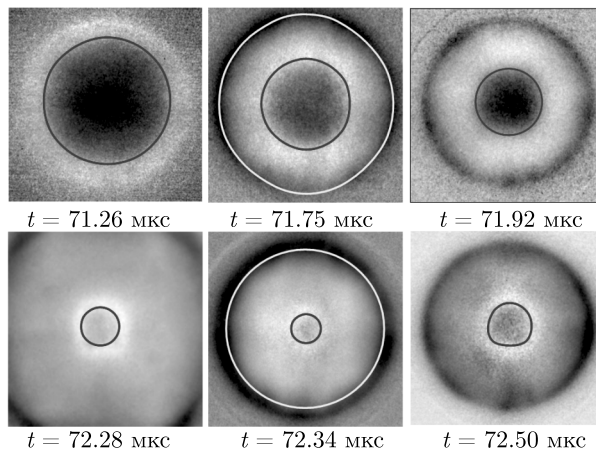


Рис. 5. (В цвете онлайн) Рентгенограммы сферической полости со сжатой плазмой гелия: темная окружность — полость сжатой плазмы, светлая окружность — внешняя граница внутренней оболочки 2 (см. рис. 2)

выбранной тактики счета хорошо описывают все контрольные точки (*p.1*, *p.2*, *p.3*) движения ударной волны по оргстеклу и стальной оболочке первого каскада (Fe1), а также измеренные рентгенографическим методом значения границ внешней оболочки экспериментальных устройств. Данные расчета воспроизводят также динамику движения внутренней границы оболочки (Fe1), зарегистрированную методом гетеродин-интерферометра [21].

Давление в сжатой плазме дейтерия и гелия определяли из газодинамических расчетов с учетом реальных термодинамических и прочностных свойств всех элементов экспериментальных

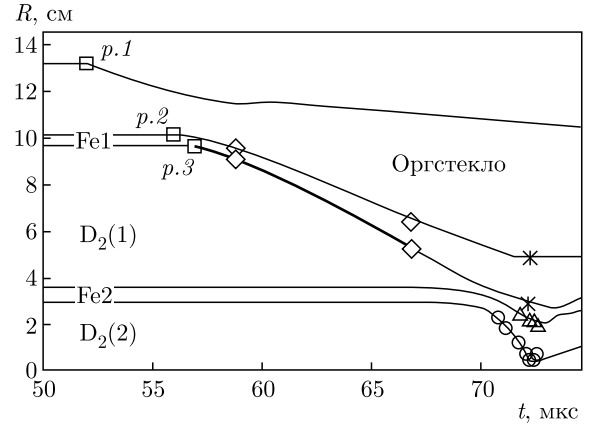


Рис. 6. Дейтерий. Сравнение экспериментальных данных и рассчитанных $R(t)$ -диаграмм: тонкие линии — расчет; \square — электроконтактная методика, \diamond — данные рентгенографирования из модельного эксперимента, толстая линия — PDV-методика; \circ , \square и $*$ — данные основного эксперимента

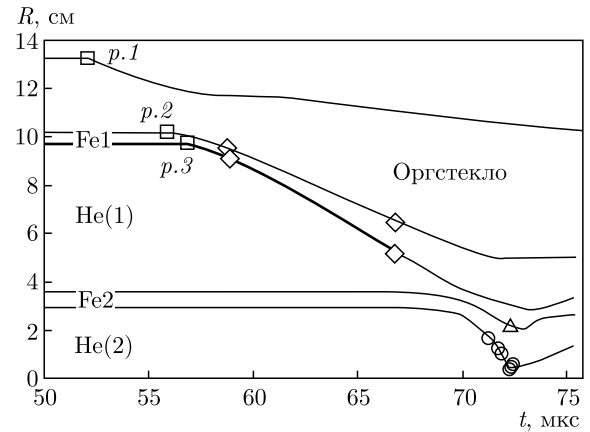


Рис. 7. Гелий. Обозначения, как на рис. 6

устройств и их УРС. Основным критерием истинности получаемого в расчетах давления можно считать удовлетворительное описание всех $R(t)$ -траекторий движения оболочек экспериментальных устройств. Из расчетов кроме $R(t)$ -диаграмм получены распределения по радиусу сжатой полости для давлений $P(R)$, температур $T(R)$ и плотностей $\rho(R)$ в плазме исследуемых газов. Учитывая кумулятивный характер процесса сжатия в сферических устройствах, для оценки термодинамических параметров авторы использовали значения давления и температуры в плазме в момент ее максимального сжатия, полученные усреднением расчетных значений $P(R)$ и $T(R)$ по массе. Здесь и далее погрешность данных соответствует максимальному отклонению их профилей от средневзвешенных значений.

Таблица 2. Расчетные и экспериментальные параметры плазмы дейтерия. Расчет термодинамики дейтерия по УРС ВНИИЭФ [24]

Дейтерий						
Фазы сжатия	t , мкс	R , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	ρ_{exp} , г/см ³	T_{calc} , кК
1	70.82	22.48	2.75 ± 2.04	0.072	0.068 ± 0.009	2.2 ± 1.7
2	71.2	18.41	4.37 ± 1.95	0.121	0.12 ± 0.016	3.5 ± 2.1
3	71.79	11.99	27.2 ± 8.2	0.465	0.447 ± 0.058	6.2 ± 2.6
4	72.06	7.17	280 ± 129	1.762	2.09 ± 0.27	11.2 ± 9.6
5	72.23	4.59	7650 ± 510	8.67	7.97 ± 1.04	39.2 ± 23.0
6	72.42	4.60	14619 ± 189	12.17	7.92 ± 1.03	52.0 ± 32.6
7	72.61	7.06	5577 ± 80	7.42	2.19 ± 0.285	35.0 ± 21.0

Таблица 3. Расчетные и экспериментальные параметры плазмы гелия. Расчет термодинамики гелия по УРС ВНИИЭФ [25, 26]

Гелий						
Фазы сжатия	t , мкс	R , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	ρ_{exp} , г/см ³	T_{calc} , кК
1	71.26	1.643	–	–	–	–
2	71.75	1.242	6.57 ± 2.23	0.151	0.17 ± 0.03	9.2 ± 5.5
3	71.92	1.018	41.0 ± 14.7	0.492	0.40 ± 0.06	20.0 ± 9.2
4	72.28	0.390	149 ± 45	1.074	0.73 ± 0.11	32.2 ± 17.2
5	72.34	0.425	16700 ± 228	13.16	13.0 ± 1.95	139.6 ± 59.0
6	72.5	0.571	15016 ± 506	12.43	10.05 ± 1.5	13.54 ± 59.0

Совокупность полученных расчетных и экспериментальных данных для различных состояний сжатой плазмы дейтерия и гелия приведены в табл. 2 и 3.

Как известно, сжатие в сферических устройствах происходит серией ударных волн, циркулирующих в объеме плазмы, и под действием сходящейся к центру оболочки. На рис. 8 для примера приведен фрагмент рассчитанных траекторий движения ударных волн в эксперименте с дейтерием вместе с $R(t)$ -диаграммами движения оболочек внешнего Fe1 и внутреннего Fe2 каскадов. Как видно на этом рисунке, после ряда отражений первой ударной волны SW1 в слоях D₂(1) и Fe2 формируется суммарная ударная волна SW⁺, которая, двигаясь в полости

D₂(2) к центру, сжимает и нагревает газ. Таким образом, в этой фазе, пока ударная волна не достигнет центра устройства, реализуется процесс ударно-волнового сжатия.

Рассмотрим фрагмент $R(t)$ -диаграммы движения оболочки второго каскада Fe2 вблизи момента максимального сжатия в эксперименте с дейтерием, приведенный на рис. 9, а для простоты ограничимся циркуляцией лишь первой ударной волны SW⁺ в полости сжатой плазмы.

На рис. 9 видно, что первая ударная волна SW⁺ в момент времени F достигает центра устройства и отражается, а в момент контакта отраженной ударной волны с внутренней границей оболочки Fe2 в состоянии К плазма оказывается уже дважды (ква-

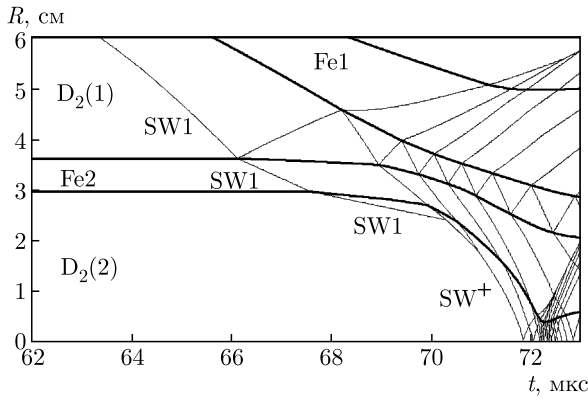


Рис. 8. $R(t)$ -диаграммы для эксперимента с дейтерием: жирные линии — границы оболочек Fe1 и Fe2; тонкие линии — ударные волны в полостях $D_2(1)$ и $D_2(2)$, SW1 — первая ударная волна, SW⁺ — суммарная первая ударная волна в полости $D_2(2)$

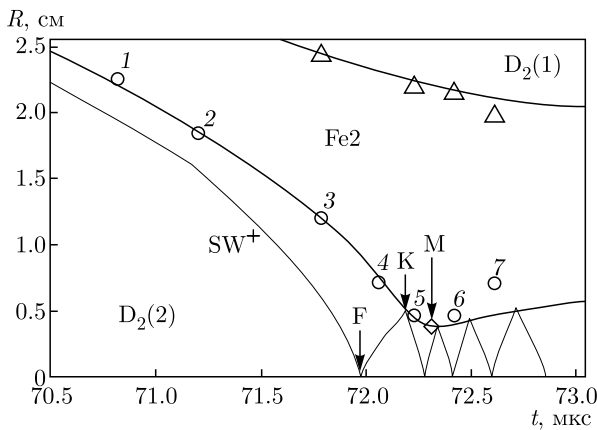


Рис. 9. Фрагмент $R(t)$ -диаграммы для эксперимента с дейтерием. Эксперимент: Δ — наружная граница оболочки Fe2, \circ — внутренняя граница оболочки Fe2. Расчет: SW⁺ — первая ударная волна; F — момент фокусировки ударной волны; K — момент отражения ударной волны от движущейся оболочки Fe2, \diamond — максимальное сжатие (M); 1–7 — фазы сжатия

зиизэнтропически) сжатой. Рассчитанные термодинамические параметры для плазмы дейтерия в состояниях F, K и M приведены в табл. 4, а аналогичные значения для плазмы гелия — в табл. 5.

С учетом того, что имеются дополнительное сжатие плазмы оболочкой, кумуляция термодинамических параметров за фронтом сходящейся ударной волны и ее поглощение последующими волнами на этапе движения к центру устройства, в некоторый момент времени между состояниями F и K реализуется квазиизэнтропическое сжатие плазмы. По-

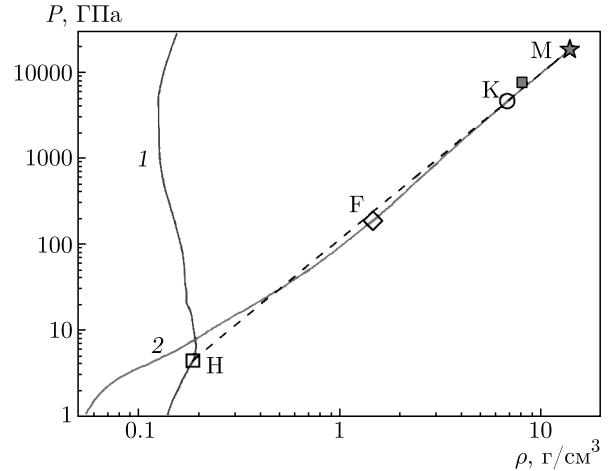


Рис. 10. (В цвете онлайн) Особенности процесса сжатия дейтерия в P - ρ -координатах: 1 — ударная адиабата, 2 — кривая сжатия дейтерия, штриховая кривая — изэнтропа; F — состояние фокусировки первой ударной волны, K — состояние контакта отраженной ударной волны с внутренней границей стальной оболочки Fe2, M — максимальное сжатие, H — точка пересечения изэнтропы и ударной адиабаты ($P = 4.51$ ГПа, $\rho = 0.18$ г/см³), красный квадрат — состояние плазмы дейтерия в момент пятого рентгенографирования (см. табл. 2)

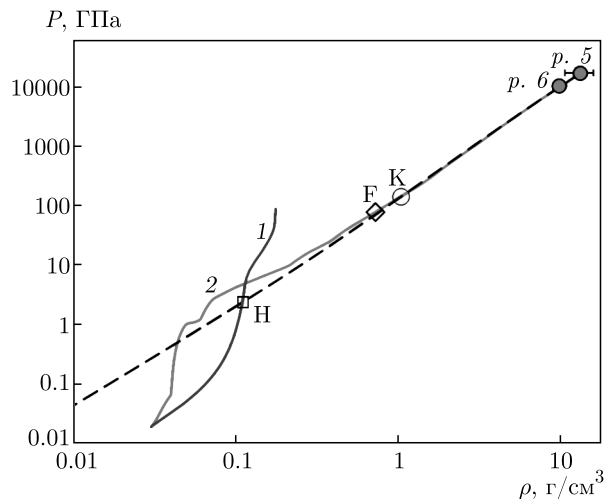


Рис. 11. (В цвете онлайн) Особенности процесса сжатия гелия в P - ρ -координатах: красные кружки — состояния плазмы гелия в момент пятого и шестого рентгенографирования (см. табл. 3). Обозначения, как на рис. 10

этому, начиная с состояния K и во все последующие моменты времени, получаемые экспериментальные данные можно отнести к результатам измерения квазиизэнтропического сжимаемости плазмы. Эти особенности сжатия дейтерия и гелия показаны на рис. 10 и 11, где в P - ρ -координатах представле-

Таблица 4. Термодинамические параметры плазмы дейтерия (опыт №1) в состояниях фокусировки (F), первого отражения (K) и максимального сжатия (M, M*)

Состояние	t , мкс	R_{Fe-2} , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	T_{calc} , К
F	72.0	0.919	188	1.45	9800
K	72.2	0.5	4639	6.75	32600
M	72.33	0.382	18100	13.81	56800
M*	72.33	0.3829	17950	13.67	—

Примечание: M* — результаты двумерного расчета.

Таблица 5. Термодинамические параметры плазмы гелия (опыт №2) в состояниях фокусировки (F) и первого отражения (K)

Состояние	t , мкс	R_{Fe-2} , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	T_{calc} , К
F	72.0	0.919	188	1.45	9800
K	72.2	0.5	4639	6.75	32600

ны рассчитанный ход сжатия плазмы для проведенных экспериментов, ударные адиабаты и изэнтропы из состояний максимального сжатия. Как видно на рис. 10, уже при плотности сжатой плазмы дейтерия $\rho \approx 4$ г/см³ рассчитанная изэнтропа хорошо согласуется с кривой 2 сжатия дейтерия, что указывает на изэнтропический характер процесса. Для плазмы гелия (рис. 11) изэнтропический характер сжатия начинается еще раньше, практически с момента F фокусировки первой ударной волны.

В условиях настоящих экспериментов с учетом малости временного интервала процесса разворота оболочки Fe2 (около 0.1 мкс), а также колебаний параметров экспериментального устройства и разброса работы его элементов зарегистрировать полость оболочки точно в момент ее остановки весьма проблематично. Действительно, в эксперименте с дейтерием (см. рис. 9) этого сделать не удалось — расчетное положение состояния максимального сжатия M находится между экспериментальными данными. Для этого состояния рассчитанные по одномерной программе термодинамические параметры сжатой плазмы дейтерия имеют следующие значения: $P = 18100 \pm 600$ ГПа, $\rho = 13.8 \pm 2.1$ г/см³, $T = 53800 \pm 3470$ К при степени сжатия $\sigma = 460 \pm 70$. Дополнительно, на этот момент времени был проведен двумерный (2D) расчет сжатия плазмы дейтерия, в котором получены практически такие же значения давления сжатия и плотности, что и в одно-

мерном (1D) расчете. Результаты 2D-расчета приведены в табл. 4. Совокупность данных, рассчитанных по 1D- и 2D-программным комплексам, а также хорошее согласие рассчитанной $R(t)$ -диаграммы дейтерия с экспериментальными данными позволяют утверждать, что при максимальном сжатии плазмы дейтерия достигнуты параметры, приведенные в табл. 4.

Результаты настоящей работы по квазиизэнтропическому сжатию плазмы дейтерия вместе с совокупностью данных из работ [1–7, 27–29] представлены на рис. 12. Как следует из рисунка, полученные в настоящей работе экспериментальные точки не противоречат общему ходу зависимости $P(\rho)$.

На рис. 12 видно, что экспериментальная точка MB4 (∇) из ранее опубликованных работ [4, 5], отклоняется из общей гладкой зависимости $P(\rho)$ дейтерия в исследованной области давлений. Для уточнения положения этой точки в настоящей работе был проведен дополнительный эксперимент с более высокой чувствительностью регистраторов, чем в работах [4, 5]. Рентгенограммы проведенного эксперимента показаны на рис. 13.

Полученные в эксперименте №3 $R(t)$ -данные по сжимаемости плазмы дейтерия приведены на рис. 14 вместе с результатами газодинамического расчета вблизи момента максимального сжатия.

Минимальный радиус $R_{min} = 0.707$ см оболочки Fe2 зарегистрирован в момент времени $t =$

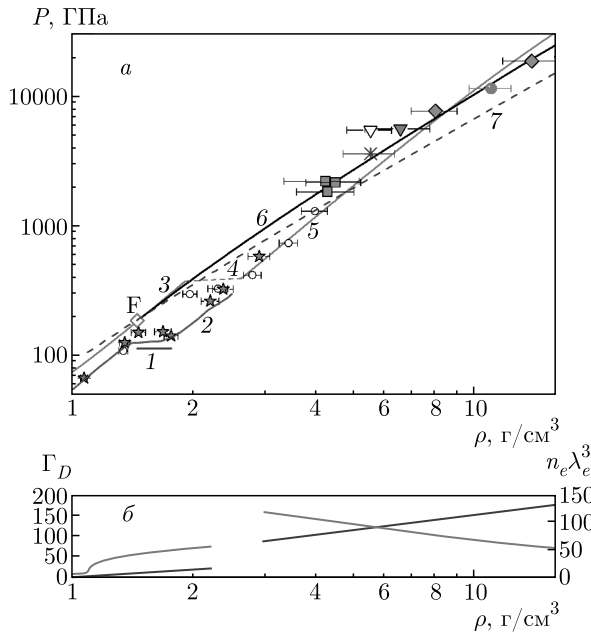


Рис. 12. (В цвете онлайн) *a*) Квазиизэнтропическая сжимаемость плазмы дейтерия. Эксперимент (настоящая работа): зеленые ромбы — опыт № 1; красный перевернутый треугольник — опыт № 3; \circ — данные работ [27–29]; красные звезды — [1, 5]; зеленые квадраты — [2–5]; ∇ — [4, 5]; красный кружок — [6]; фиолетовая звезда — [7]. Расчет: 1 — межфазная граница плазменного фазового перехода [30]; 2 — изэнтропа [31]; настоящая работа: 3, 4, 5 — изэнтропа ($S = 34.5$ Дж/г·К) с диссоциативно-плазменным фазовым переходом [14], проходящая через точку фокусировки F (УРС SANA); 6 — изэнтропа [1] из точки фокусировки F (QMD-моделирование); 7 — то же в модифицированном методе WPMD–DFT [59]. *б*) Дебаевский параметр кулоновской неидеальности Γ_D (красная кривая) и параметр вырождения свободных электронов $n_e \lambda_e^3$ (синяя кривая) на изэнтропе $S = 34.5$ Дж/г·К

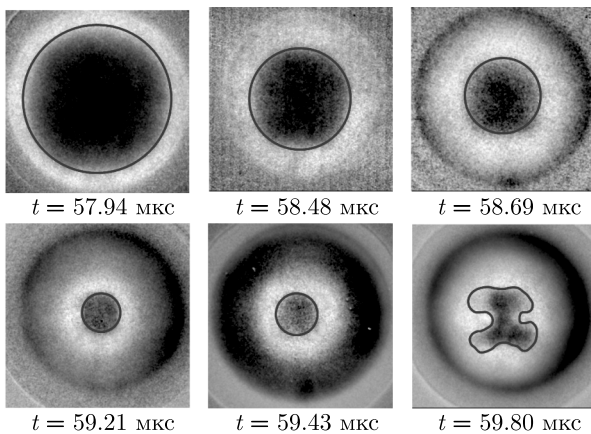


Рис. 13. (В цвете онлайн) Экспериментальные рентгенограммы в опыте № 3 (см. табл. 1)

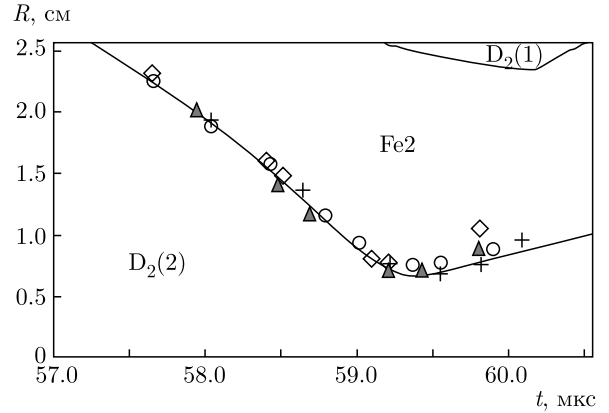


Рис. 14. (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных данных и рассчитанной $R(t)$ -диаграммы в эксперименте № 3 с дейтерием. Сплошные линии — расчет. Эксперимент: красные треугольники — настоящая работа; \diamond , \circ — из работ [4, 5], + — данные по гелию в эксперименте с аналогичным устройством [8]

= 59.43 мкс. Термодинамические параметры для дейтерия в этот момент времени имеют следующие значения: $P = 5620 \pm 600$ ГПа, $\rho = 6.5 \pm 1.1$ г/см^3 , $T = 26800 \pm 3470$ К при степени сжатия $\sigma = 180$. Неопределенность данных по давлению и температуре соответствует максимальному отклонению их профилей от средневзвешенных значений. Результат эксперимента, полученный в настоящей работе при использовании регистраторов с более высокой чувствительностью, чем в работах [4, 5], приведен на рис. 12 и указывает на отсутствие особенности сжатия плазмы дейтерия в этой области давления.

Результаты по квазиизэнтропическому сжатию плазмы гелия из работ [3, 4, 7–12] и настоящей работы представлены на рис. 15.

Отметим особенности экспериментальных данных по сжимаемости неидеальной плазмы дейтерия, полученных в экспериментах № 1 и № 2 (см. табл. 1), данных работ [4, 5] и результатов по гелию [8], приведенных на рис. 14. Как показывает анализ полученных данных, для использованных в этих работах аналогичных экспериментальных устройств и практически одинаковых начальных состояний газов рассчитанные $R(t)$ -диаграммы движения внутренних границ оболочек Fe_2 для гелия и дейтерия совпадают, а до состояния максимального сжатия и вблизи него хорошо согласуются с экспериментальными данными. Фактически это означает, что в достигнутых в настоящих экспериментах условиях высоких температур и плотностей параметры динамического сжатия сильнонеидеальной и вырожденной

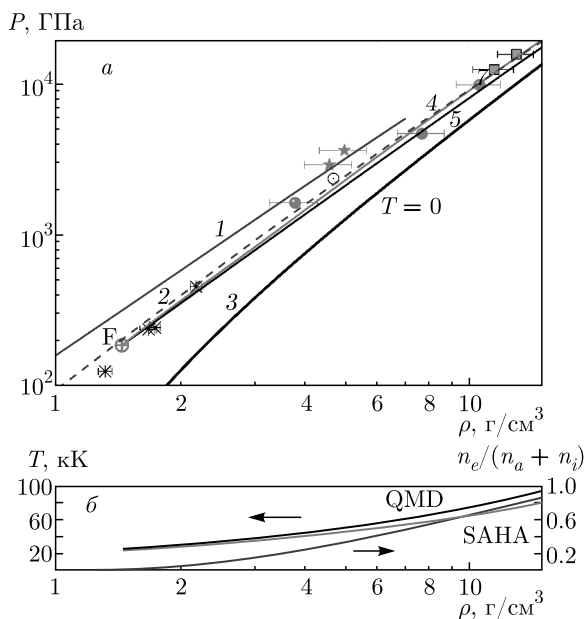


Рис. 15. (В цвете онлайн) Квазиизэнтропическая сжимаемость плазмы гелия. Эксперимент (настоящая работа): голубые квадраты — фазы сжатия 5 и 6 (см. табл. 3). Красные кружки — данные работ [3, 4, 11]; * — [12], красные звезды — [9, 10], \circ — [7]. Расчет [11] (УРС ВНИИЭФ): 1 — изэнтропа $S = 16$ Дж/г·К; 2 — изэнтропа $S = 14.9$ Дж/г·К (синие штрихи); 3 — изотерма $T = 0$; расчет (настоящая работа) из начальной точки F ($P_0 = 188$ ГПа; $\rho_0 = 1.45$ г/см³): 4 — изэнтропа $S = 24.04$ Дж/г·К (красная линия, УРС SAHA); 5 — изэнтропа (QMD-моделирование). б) Температура (красная линия) и степень ионизации (синяя линия) гелия вдоль изэнтропы из точки F (расчеты по УРС SAHA); черная линия — расчет температуры в рамках QMD-моделирования

плазмы гелия и дейтерия очень близки и не различимы в пределах точности настоящего эксперимента. Это, в свою очередь, означает [53] близость в этом диапазоне параметров для усеченного calorического УРС гелия и дейтерия, $U(P, V)$. Вместе с тем следует подчеркнуть [57], что близость calorического УРС $U(P, V)$ еще не означает полной тождественности термодинамических свойств обсуждаемой плазмы дейтерия и гелия, что подтверждается выполненными в настоящей работе вдоль траекторий динамического сжатия расчетами термического УРС $T(P, V)$ в рамках как химической модели SAHA, так и *ab initio* подходов квантовой молекулярной динамики (quantum molecular dynamics, QMD) и молекулярной динамики волнового пакета (wave packet dynamics, WPMD) см. ниже рис. 18.

Аналогичная особенность в сжимаемости неидеальной вырожденной плазмы гелия и дейтерия на-

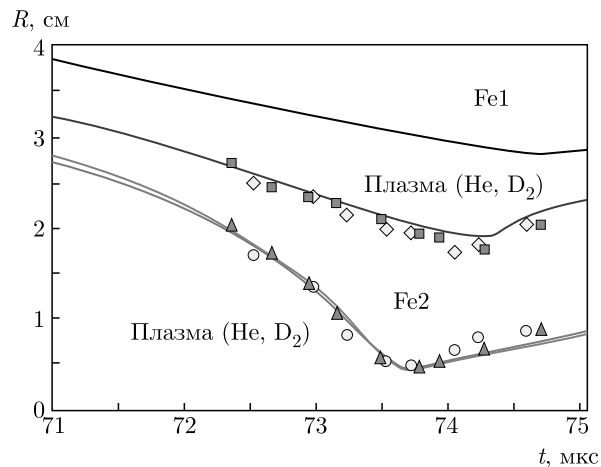


Рис. 16. (В цвете онлайн) Фрагменты $R(t)$ -диаграмм для экспериментов с дейтерием и гелием в области давлений $P \sim 10000$ ГПа. Экспериментальные данные: желтые кружки и ромбы — He, зеленые квадраты и треугольники — D₂. Сплошные линии — расчет: зеленая — дейтерий; красная — гелий

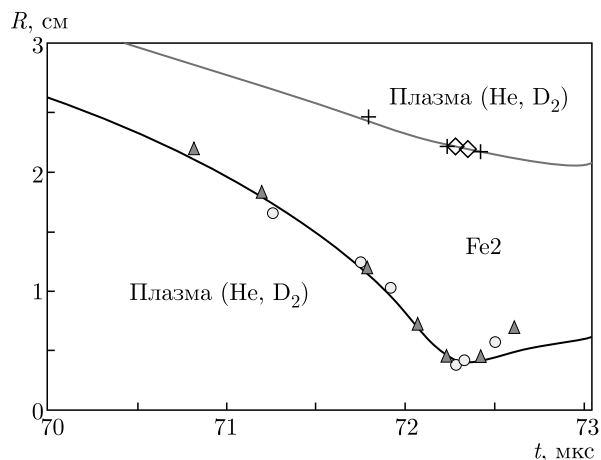


Рис. 17. (В цвете онлайн) Фрагменты $R(t)$ -диаграмм для экспериментов с дейтерием и гелием в области давлений $P \sim 20000$ ГПа. Экспериментальные данные: желтые кружки, \diamond — гелий; зеленые треугольники, + — дейтерий. Сплошные линии — расчет

блюдается и для экспериментальных данных в области давлений $P \sim 10000$ ГПа (рис. 16) и $P \sim 20000$ ГПа (рис. 17).

Как правило, после момента остановки данные эксперимента демонстрируют более резкий разворот границ по сравнению с рассчитанными $R(t)$ -траекториями. Это объясняется двумя обстоятельствами: 1) наличием неустойчивостей, которые начинают сильно развиваться с момента резкого торможения

обжимающей оболочки (указанные неустойчивости наша 1D-программа [23] не учитывает); 2) большой ошибкой обработки экспериментальных рентгенограмм в «разлетной» фазе. Например, на рис. 4 в опыте с дейтерием на последней рентгенограмме полость существенно несферическая, и процесс ее выделения чисто условный — по функциональному признаку. Различием расчета и эксперимента в разлетной фазе мы пренебрегаем.

Для получения проекции реальной полости на плоскость необходимо использовать «томографию» — регистрацию с нескольких ракурсов. Сделать такую томографию на нашей установке очень проблематично — можно лишь в каждом эксперименте получать не более трех состояний полости с трех ракурсов. Поэтому считается хорошим согласием расчета и эксперимента, если описываются характерные моменты движения ударных волн и оболочек, регистрируемые в отдельных модельных экспериментах, момент первого рентгенографирования, когда влиянием УРС сжимаемого газа можно пренебречь и «автоматически» описывается весь дальнейший ход сжатия вплоть до момента остановки оболочки.

4. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ТЕОРИИ СИЛЬНОНЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

4.1. Расчеты параметров динамического сжатия дейтерия и гелия по модели SAHA

Для анализа результатов экспериментов, полученных в данной работе, были проведены расчеты ударного и изэнтропического сжатия по теоретической модели SAHA, развитой для описания термодинамики многокомпонентной сильнонеидеальной плазмы с возможными фазовыми превращениями [32, 33]. Ее применение показало удовлетворительное согласие расчетов со всей совокупностью имевшихся к тому времени экспериментальных данных по ударному сжатию дейтерия (и водорода) в твердом, жидком и предварительно сжатом газовом состоянии с начальными плотностями в диапазоне от 0.13 до 0.33 г/см³, полученных как в России [34–36], так и за рубежом [37, 38]. Для описания УРС дейтерия и гелия в области рекордно высоких сжатий настоящей работы был использован модифицированный вариант модели SAHA [33], показавший хорошее согласие при описании результатов предыдущей серии экспериментов по квазиизэнтропическо-

му сжатию плазмы дейтерия до давлений 5000 ГПа [5]. Модель SAHA была разработана для расчета состава и термодинамических функций плотного сильнонеидеального и частично ионизованного водорода (дейтерия) и других молекулярных и инертных газов в широком диапазоне температур и давлений, достигаемых в современном динамическом эксперименте. Расчеты по модели SAHA имеют правильную асимптотику в пределах как высоких, так и низких температур. В первом случае они совпадают с высокотемпературными характеристиками ударных адиабат, рассчитанных с использованием как асимптотически точного аналитического приближения (код SAHA-S) [39], так и *ab initio* подхода — так называемых интегралов по траекториям (path integral Monte Carlo, PIMC) [40]. В пределе низких температур расчеты по модели SAHA-D находятся в удовлетворительном согласии, во-первых, с результатами расчета параметров ударных адиабат, полученных с использованием «неэмпирического атом-атомного приближения» [41, 42], а во-вторых, с результатами расчета в рамках *ab initio* подхода — QMD [43].

В варианте химической модели, реализованном в коде SAHA, плотная и горячая плазма дейтерия и/или гелия описывается как равновесная сильно-взаимодействующая («неидеальная») смесь атомов, молекул, атомных и молекулярных ионов и электронов. Последние могут быть частично вырожденными. Этот подход известен как метод минимизации свободной энергии [44, 45] и фактически сводится к решению системы нелинейных уравнений химического и ионизационного равновесия с учетом различных «поправок» на взаимодействие, учитывающих как эффект кулоновского взаимодействия зарядов, так и влияние интенсивного короткодействующего отталкивания и притяжения. При этом во всех вышеуказанных реакциях учитывается сдвиг равновесия вследствие частичного вырождения электронов.

В рамках принятого в модели SAHA способа учета короткодействующего отталкивания (приближение «мягких сфер» [46]) определяющими при расчетах плотной и нагретой плазмы водорода и гелия являются принятые эффективные «собственные размеры» каждого сорта частиц, а также показатель степенного отталкивания в эффективном потенциале мягких сфер. При этом по своему влиянию на итоговые термодинамические характеристики плазмы в случае дейтерия доминируют три величины — эффективные «диаметры» молекул, атомов и ионов дейтерия — D₂, D, D⁺. При описании гелия — это

эффективные диаметры атома и одно- и двукратно ионизованных ионов гелия — He и He⁺ и He⁺⁺. При расчетах плазмы дейтерия в методике кода SANA-D указанные выше диаметры молекул D₂ и атомов D выбираются в максимальном соответствии с рекомендациями неэмпирического атом-атомного приближения [41, 42]. Соответственно этому в предыдущих расчетах параметров ударного сжатия дейтерия (водорода) [34] отношение эффективных диаметров молекулы D₂ и атома D принималось равным 1.25 при выбранном показателе степенного отталкивания $m = 6$. Величина диаметра молекулы D₂ определялась из условия наилучшего описания параметров «холодной» кривой (изотермы $T = 0$) [47].

В области высоких температур и развитой ионизации расчет влияния короткодействующего отталкивания в модели SANA дополняется выбором параметров, описывающих участие в этом механизме взаимодействия заряженных компонент. В качестве эффективного диаметра для молекулярного иона D₂⁺ в расчетах настоящей работы был принят размер, равный среднему значению между размером молекулы D₂ и атома D. Ионы D⁺ и электроны в рамках методики SANA считаются также участвующими в механизме короткодействующего межчастичного отталкивания, но с радиусами, равными нулю. Это физически соответствует учету вклада ионов D⁺ и электронов в рамках условия непроницаемости для них всех составных частиц, D, D₂, D₂⁺. Это соответствует исходной концепции «химической модели плазмы» [44, 45, 48] как равновесной совокупности по определению непроницаемых «свободных» составных частиц, занимающих разделенные участки фазового пространства, недоступные для остальных «свободных» комплексов.

Процедуру расчета, реализованную в модели и коде SANA, дополняет расчет возможных фазовых расслоений системы. Подчеркнем, что помимо расчета простых вандерваальсовых («энтальпийных» [49]) переходов типа газ–жидкость, но при этом в неконгруэнтном варианте [50, 51] методология химической модели плазмы и, в частности, код SANA приспособлены для описания необычных, энтропийных («делокализационных») фазовых переходов [52] в плотном горячем флюиде водорода и/или гелия. В частности, это диссоциативно-плазменный [32] и чисто плазменный [53] фазовые переходы в водороде (дейтерии) и двухстадийный плазменный переход в гелии в версии работы [54] или одностадийный с двукратной ионизацией гелия в версии работы [55].

В области высоких температур и плотностей плазмы с частичной или полной ионизацией су-

щественную роль играют поправки, учитывающие сильное кулоновское взаимодействие. Для описания этих эффектов в модели SANA используется модифицированный вариант псевдопотенциального приближения [50, 56, 57]. Кулоновские поправки в этом приближении практически совпадают с известным дебаевским приближением в пределе слабой неидеальности и отличаются от него более слабой зависимостью этих поправок от интенсивности взаимодействия в пределе сильной неидеальности $\Gamma_D = (e^2/kT)r_D > 1$ (r_D — дебаевский радиус). Приближение из работ [50, 56] построено в терминах бинарных корреляционных функций, при выборе которых в основу положено точное выполнение ряда общих соотношений, наложенных на эти функции и не связанных условием малости параметра Γ_D .

В области плотной горячей плазмы методика, реализованная в коде SANA, учитывает эффект вырождения электронов. Эффекты вырождения электронов в методике модели SANA проявляются двояко. Прежде всего — в идеально-газовом слагаемом, описывающем вклад свободных электронов. Помимо этого в рамках принятой модификации псевдопотенциального приближения [50, 51] вырождение также учитывается в уменьшении (с ростом вырождения) участия электронов в экранировании зарядов. В результате в пределе сильного вырождения электронов все экранирование ионов реализуется за счет ион-ионных корреляций (см. подробнее работу [57]). Согласно проведенным ранее расчетам [5], в случае квазиизэнтропического сжатия дейтериевой и гелиевой плазмы эффект вырождения электронов сказывается при высоких давлениях квазиизэнтропического сжатия мегабарного диапазона.

Расчеты динамического сжатия дейтерия и гелия по модели SANA настоящей работы проводились в режиме изэнтропии с начальными параметрами, соответствующими моменту фокусировки первой ударной волны в центре сферической полости с исследуемым газом (состояние F в табл. 4 и 5). Результаты этих расчетов в сравнении с экспериментальными данными в координатах давление–плотность и температура–плотность приведены на рис. 12 и 18.

Эффективные размеры атома и молекулы, рекомендуемые неэмпирическим атом-атомным приближением [41, 42], не являются постоянными, а плавно уменьшаются с ростом температуры и плотности. В методике, используемой в коде SANA, величины эффективных размеров всех сортов частиц считаются фиксированными. Этим объясняется тот факт [5, 53], что точность описания эксперименталь-

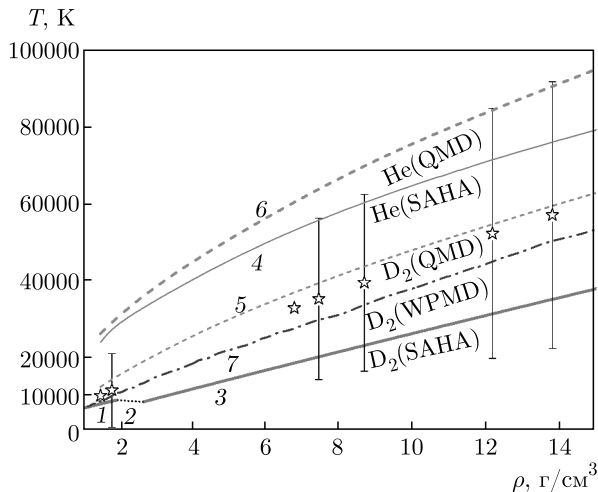


Рис. 18. Температура изэнтропически сжимаемой плазмы дейтерия и гелия. Расчеты настоящей работы вдоль изэнтроп дейтерия и гелия из начальной точки F с совпадающими параметрами $P_0 = 188$ ГПа, $\rho_0 = 1.45$ г/см³: 1, 2, 3 — изэнтропа дейтерия согласно УРС SAHA; 4 — изэнтропа гелия согласно УРС SAHA; 5, 6 — изэнтропы дейтерия и гелия в рамках QMD-моделирования; 7 — изэнтропа дейтерия в рамках моделирования методом WPMD-DFT. Значки — температура плазмы дейтерия согласно УРС ВНИИЭФ

ных данных, даваемая расчетами по модели SAHA с фиксированными эффективными размерами атома и молекулы, падает с ростом плотности. По этой причине в работах [5, 53] и в настоящей работе при описании экспериментальных данных в области давлений выше 300 ГПа эффективное отношение размеров атома D и молекулы D₂ уменьшалось до величины, равной 0.6 [32] от величины 0.8, принятой в области низких давлений [34]. Важным физическим следствием такого уменьшения является то, что суммарный эффективный «объем» двух атомов дейтерия в реакции диссоциации становится меньше «объема» диссоциировавшей молекулы. Результатом этого является отмеченное ранее [32] резкое увеличение степени диссоциации и ионизации дейтерия на исследуемой изэнтропе в районе давлений выше 300 ГПа и появление в расчетах по модели SAHA-D второй, говоря условно, такой «атомарной» ветви изэнтропы, что переход между ветвями имеет вид фазового перехода первого рода. В условиях обсуждаемого в настоящей работе эксперимента по интенсивному динамическому сжатию последовательность термодинамических состояний в процессе реверберации серии затухающих ударных волн, согласно расчетам, проходит заметно выше области указанного фазового расслоения, слабо

влияя на поведение изэнтропы дейтерия, получаемой в расчете по методике SAHA в области давлений 5000–20000 ГПа. Результаты этого расчета в сравнении с результатами настоящего эксперимента в плоскости P– ρ приведены выше на рис. 12, а в плоскости T– ρ — на рис. 18 вместе результатами *ab initio* подходов в рамках методов QMD [58], а во вторых, WPMD с применением теории функционала плотности (WPMD-DFT) [59]. Краткая информация о деталях указанных методик расчетов QMD и WPMD-DFT приведена ниже. Обсуждение физических следствий, которые можно сделать из проведенного сравнения теории и эксперимента, приведены в разд. 5.

4.2. Расчет параметров динамического сжатия плазмы гелия в модели SAHA

Специфика применения модели и кода SAHA к расчетам параметров динамического сжатия плазмы гелия обусловлена прежде всего иным составом плазмы гелия в сравнении с плазмой дейтерия — в плазме гелия отсутствуют сильносвязанные молекулы и связанные с этим особенности термодинамики, в частности, возможность плавной или разрывной диссоциации давлением, но при этом при высоких температурах в процессе сжатия появляется возможность заметной двукратной ионизации гелия. Как и в случае дейтерия, при расчете параметров горячей плотной плазмы гелия в рамках методики SAHA важным является выбор величин собственных размеров атома и ионов гелия — He, He⁺ и He⁺⁺. В настоящих расчетах плазмы гелия использовалась методика и код SAHA-He, уже показавшие ранее свою эффективность в описании результатов эксперимента по динамическому сжатию плазмы гелия в более низком диапазоне давлений [12, 33]. Как и в случае дейтерия, в настоящих расчетах плазмы гелия использовался модифицированный вариант псевдопотенциальной модели кулоновской неидеальности, обобщенный на случай многократной ионизации [51]. Самосогласованная граница сверху вклада возбужденных состояний атома и иона гелия, одновременно являющаяся границей снизу («глубиной») эффективного притяжения в модифицированном кулоновском потенциале электрон-ион, в настоящих расчетах фиксировалась на энергии связи пары электрон-ион на среднем расстоянии между «тяжелыми» частицами, т. е. ионами и атомами [12]. Собственный размер (диаметр) атома гелия определялся из условия оптимального описания «холодной кривой» гелия. Отношение

диаметров ионов гелия He^+ и He^{++} к диаметру атома определялось в результате специальных расчетов методом Хартри–Фока зависимости спектров атома и ионов при их сжатии в рамках приближения «ограниченного атома» [45, 60]. Вклад вырождения электронов в термодинамику плазмы гелия учитывался в рамках той же процедуры, что и в расчетах плазмы дейтерия. Результаты расчета параметров динамического сжатия плазмы гелия до давлений 20000 ГПа в сравнении с результатами настоящего эксперимента в плоскости P – ρ приведены на рис. 15, а в плоскости T – ρ — на рис. 18.

4.3. Расчеты параметров изэнтропического сжатия дейтерия и гелия в рамках *ab initio* подходов метода квантовой молекулярной динамики (QMD)

Помимо квазихимического представления (код SAHA) в настоящей работе были проведены расчеты параметров динамического сжатия плазмы дейтерия и гелия в рамках двух вариантов *ab initio* подхода. В первом, QMD, электронная подсистема описывается в рамках метода функционала плотности (DFT) [61, 62]. Во втором, WPMD-DFT, динамика электронной подсистемы описывается в рамках метода волновых пакетов [59]. Результатом этого расчета является (неоднородное) пространственное распределение электронов в поле подвижных ионов. Динамика и соответствующая ей термодинамика (точечных) классических ионов в поле электронов описывается в рамках хорошо развитой процедуры молекулярной динамики (MD) [63]. Напомним, что оба метода, QMD и WPMD-DFT, не используют для проведения расчетов (подобно квазихимическим методикам SAHA-D и SAHA-He) никакой феноменологической информации об изучаемом веществе, такой как потенциалы ионизации, энергетические спектры связанных комплексов и т. д. [44]. Для расчетов задаются только заряды и массы ядер элементов, составляющих исследуемое вещество. Методика расчетов QMD в настоящей работе является развитием и продолжением методики, реализованной и описанной в работе [58]. Процедура расчетов QMD реализована с использованием известного пакета VASP [64], для обменно-корреляционного функционала использовалось обобщенно-градиентное приближение (GGA) с параметризацией PBE [65].

В сравнении с расчетами, реализованными в работе [58], в настоящей работе было заметно увеличено количество моделируемых частиц (ядер и электронов), что позволило существенно повысить вы-

числительную точность расчетов. Конкретно, в кубическую ячейку моделирования помещалось от 64 до 256 ядер атомов дейтерия или гелия (и соответствующее количество электронов для обеспечения электронейтральности) в зависимости от термодинамических параметров. Проверяться сходимость результатов расчетов от числа частиц. Энергия обреза E_{cut} , определяющая количество плоских волн для представления волновых функции электронов, варьировалась в расчетах в диапазоне от 600 до 1200 эВ. Для аппроксимации зоны Бриллюэна при расчете электронных свойств дейтерия использовалась одна \mathbf{k} -точка: либо особая точка Балдерши $\{1/4, 1/4, 1/4\}$, либо Γ -точка. Все расчеты проводились в каноническом ансамбле. Температура ионов T_i контролировалась с помощью термостата Нозе–Гувера [63]. Температура электронов $T_e = T_i$ задавалась независимо и входила в числа заполнения электронов по энергиям, определяемые с помощью функции Ферми–Дирака. Как и в других методах равновесного атомистического моделирования, в методе QMD задается некоторая начальная конфигурация ионов, а затем в процессе эволюции системы происходит установление термодинамического равновесия. Равновесные термодинамические характеристики вычисляются на равновесном участке моделирования путем усреднения по конфигурациям, что, в том числе, определяет статистическую погрешность моделирования.

Непосредственными термодинамическими величинами, получаемыми в методе QMD в результате описанной выше процедуры атомистического моделирования, являются две главные «сумматорные» величины — давление $P(T, \rho)$ и внутренняя энергия $U(T, \rho)$ как функции плотности и температуры. В соответствии с методом Ферми–Зельдовича [66] это позволяет восстановить, во-первых, ход изэнтропы в P – V -плоскости, а во-вторых, темп изменения температуры вдоль этой изэнтропы. Зная из результатов QMD-моделирования термическое и калорическое уравнения состояния, $P(\rho, T)$ и $U(T, \rho)$, это может быть сделано не единственным образом. В настоящих расчетах использовался широко принятый способ [58, 67], состоящий в интегрировании вдоль построенной в P – V -плоскости изэнтропы известного термодинамического соотношения

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \ln T}{\partial V}\right)_S &= -\left(\frac{\partial U(P, V)}{\partial P}\right)_V^{-1} = \\ &= -\left(\frac{\partial P(V, T)}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial U(V, T)}{\partial T}\right)_V^{-1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Соответственно, эта изэнтропа выпускается из начальной точки в P - V -плоскости, где известна величина температуры T_0 .

Для дейтерия были вычислены изотермы и изохоры в диапазоне температур от 0.3 до 100 кК и плотностей от 1 до 15 г/см³, что существенно расширило диапазон, исследованный ранее [58], и позволило выполнить расчеты изэнтропического сжатия дейтерия до давлений около 20000 ГПа. Для гелия область проведенных расчетов также соответствовала диапазону температур от 0.3 до 100 кК и плотностей от 1 до 15 г/см³.

В качестве начальной точки изэнтропы динамического сжатия дейтерия была выбрана экспериментальная точка F (см. табл. 4) с плотностью $\rho = 1.45$ г/см³; температура в этой точке подбиралась из результатов QMD-моделирования для получения экспериментального давления $P = 188$ ГПа. Найденная так температура оказалась равной 6.9, что близко к данным работы [67], методика моделирования в которой в основных моментах совпадает с прежними расчетами [58]. Отличие связано с меньшим числом частиц, учитывавшихся в работе [58] при моделировании в области давлений около 100 ГПа (256 в данной работе по сравнению с 64 в [58]). В качестве начальной точки изэнтропы динамического сжатия гелия была также выбрана экспериментальная точка F из табл. 5. Результаты описанных выше расчетов в плоскостях P - ρ и T - ρ показаны на рис. 12, 15 и 18.

4.4. Расчет параметров изэнтропического сжатия дейтерия методом молекулярной динамики волновых пакетов с применением теории функционала плотности (WPMD-DFT)

В дополнение к методу QMD, расчеты изэнтропы сжатия дейтерия были проведены модифицированным методом WPMD-DFT [59]. В отличие от QMD, в этом методе динамика электронов моделируется одновременно с ионной динамикой. Движение электронов рассчитывается на основе численного решения уравнений Гамильтона, схожих с уравнениями для классической молекулярной динамики и отличающихся лишь дополнительными уравнениями для ширины пакетов.

В исходном методе WPMD гамильтониан системы содержит только члены, описывающие кинетическую энергию и энергию кулоновского взаимодействия частиц (без псевдопотенцилов) [68, 69]. В модифицированном методе WPMD-DFT, использу-

емом в настоящей работе, учтена также энергия обменно-корреляционного взаимодействия в приближении теории функционала плотности

$$E_{XC} = \int_V \epsilon_{XC}[n_{1/2}(\mathbf{r}), n_{-1/2}(\mathbf{r})] \times \\ \times [n_{1/2}(\mathbf{r}) + n_{-1/2}(\mathbf{r})] d\mathbf{r}, \quad (3) \\ n_\sigma(\mathbf{r}) = \langle \Psi_\sigma(\mathbf{r}) | \Psi_\sigma(\mathbf{r}) \rangle, \\ \sigma = \{-1/2, 1/2\},$$

где ϵ_{XC} — функционал локальной плотности с учетом спина [70], $n_\sigma(\mathbf{r})$ — суммарная плотность электронов с проекцией спина, вычисляемая по мгновенным положениям волновых пакетов на каждом шаге по времени (всем электронам изначально присваивается проекция спина, равная 1/2 или -1/2). Также в данной реализации метода WPMD-DFT вместо периодических граничных условий используются отражающие стенки, что позволяет решить вычислительную проблему с неограниченным распылением волновых пакетов для свободных электронов [71], хотя и требует учета численных эффектов, связанных с размером системы и неоднородностью электронной плотности вблизи границ расчетной ячейки.

Представленная модель плазмы позволяет описывать не только свободные электроны и ионы, но также и их связанные состояния: атомы, молекулы и молекулярные ионы. Однако точность описания их ограничена фиксированной гауссовой формой параметризованной волновой функции электрона. Точность представления связанных состояний можно повысить, например, используя модельную волновую функцию электрона, состоящую из нескольких гауссовых волновых пакетов [72]. Следует отметить, что ионизационное равновесие в моделируемой системе устанавливается автоматически и не требует привлечения дополнительной процедуры.

Для расчета изэнтропы с помощью WPMD-DFT использовался прямой метод, основанный на решении уравнений движения. Изначально система из 256 пар электронов и ионов выводилась на равновесие при плотности $\rho = 1.09$ г/см³ и температуре $T = 6900$ К с помощью термостата Нозе-Гувера. Затем термостат отключался и выполнялось чередование этапов сжатия системы и равновесной динамики. На каждом равновесном этапе длительностью 50 фс проводился расчет средних значений давления и температуры, представленных в виде функций от плотности на рис. 12 и 18. Адиабатичность моделируемого процесса следует из постановки численно-

го эксперимента, а соответствие изэнтропе подтверждается сходимостью результатов при уменьшении скорости сжатия. К настоящему времени получены результаты для минимальной скорости сжатия $6.4 \cdot 10^{-5} \text{ нм}^3/\text{фс}$, при этом аналогичный расчет для $1.2 \cdot 10^{-4} \text{ нм}^3/\text{фс}$ приводит к различию в 44000 К (45%) по температуре и 1700 ГПа (11%) по давлению при максимальной плотности $\rho = 13.4 \text{ г/см}^3$ на конце траектории. Эти величины и следует считать погрешностью полученных результатов для соответствующих величин при максимальной плотности.

Важным преимуществом теоретических методов, используемых в настоящей работе, является наличие в их результатах помимо данных о положении изучаемой изэнтропы в плоскости P - ρ (что является информацией лишь об усеченном калорическом УРС $U(P, \rho)$) информации о температуре в случае QMD и WPMD-DFT, т. е. о термическом УРС $T(P, \rho)$, и, кроме того, о величине энтропии в случае SAHA. Это обстоятельство имеет особую важность, поскольку известно, что теоретическая информация, содержащаяся в калорическом УРС $U(P, \rho)$, существенно неполна [53]. Это означает, в частности, что сколь угодно хорошее соответствие результатов теории с экспериментом в описании формы изэнтропы $S = \text{const}$ в P - ρ -плоскости не гарантирует, строго говоря, никакой точности в описании этой теорией величины температуры на этой изэнтропе. Тем более важно сравнить величины температуры, даваемые тремя теоретическими приближениями, используемыми в настоящей работе, вдоль экспериментальной изэнтропы. Такое сравнение для плазмы дейтерия и гелия представлено на рис. 18.

4.5. Обсуждение результатов сравнения теоретических расчетов с экспериментальными данными

Из представленного на рис. 12 и 18 сравнения следует, что параметры изэнтропы, выпущенной из точки с давлением и плотностью, соответствующими состоянию дейтерия и гелия в момент «фокусировки» ударной волны к центру (точка F в табл. 4 и 5), рассчитанные по УРС SAHA и QMD, находятся в удовлетворительном согласии с результатами настоящего эксперимента как для дейтерия, так и для гелия. Также в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными находятся результаты пилотных расчетов параметров динамического сжатия дейтерия по методу волновых пакетов (WPMD-DFT). Учитывая результаты проведенного ранее аналогичного сравнения с результатами

предыдущих экспериментов по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия и гелия в области более низких давлений и степеней сжатия [3–5, 11, 12], можно заключить, что приближение SAHA и теоретические подходы QMD [58] и WPMD-DFT [59] удовлетворительно воспроизводят в P - ρ -координатах общий ход совокупности экспериментальных данных по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия и гелия до $P \sim 20000 \text{ ГПа}$ (200 Мбар). Вместе с тем проведенное на рис. 18 сравнение результатов расчетов температуры в подходах УРС ВНИИЭФ, УРС SAHA вдоль исследованных траекторий динамического сжатия плазмы дейтерия и гелия в диапазоне $P = 100$ – 20000 ГПа с результатами «численного эксперимента» в рамках QMD и WPMD-DFT демонстрируют значительную неопределенность нашего знания температуры и энтропии в интересующей нас области состояний неидеальной плазмы.

Согласно существующим представлениям, основным физическим процессом, определяющим детали поведения плазмы дейтерия и гелия в обсуждаемой области состояний многократного сжатия и повышения температуры, является постепенный или, возможно, скачкообразный распад (делокализация) связанных комплексов – молекул, атомов, молекулярных и атомарных ионов в случае водорода (дейтерия) и одно- и двукратной ионизации в случае гелия. Существенно, что указанные доминирующие процессы протекают в условиях одновременного действия двух возмущающих факторов, существенно искажающих протекание вышеупомянутой делокализации связанных комплексов. Во-первых, интенсивного межчастичного взаимодействия, т. е. сильной неидеальности, причем одновременно по разным каналам взаимодействия — кулоновского взаимодействия заряженных частиц и интенсивного короткодействующего как отталкивания, так и притяжения в первую очередь «тяжелых» частиц (атомов, молекул и т. д.). Во-вторых, это сильное вырождение свободных электронов, также существенно искажающее прежде всего ход «ионизации давлением» [5, 73, 74] и др. В идеологии химической модели плазмы (код SAHA) оба указанные эффекта описываются в рамках условно разделенных механизмов и описываются сложно, но самосогласованно в рамках *ab initio* подходов QMD и WPMD-DFT.

Главное следствие обсуждаемых факторов (неидеальности и вырождения) заключается в том, что упомянутый выше доминирующий физический процесс — распад связанных комплексов — может при определенных условиях стать разрывным с появлением специфического делокализационного фа-

зового перехода первого рода, сопровождающегося скачкообразным изменением равновесного «состава» — степени диссоциации, ионизации и др. Проблема делокализационного фазового перехода — диссоциативного, «плазменного» (ионизационного) и др., является в течение многих лет одной из центральных тем в физике неидеальной плазмы [75]. С этой же проблемой гипотетических делокализационных фазовых переходов в значительной мере связана и мотивация экспериментов настоящей работы, продолжающей и развивающей достаточно давнюю историю экспериментальных поисков таких фазовых переходов методами динамического эксперимента [53, 76]. Еще в начале 70-х годов прошлого века в пионерских экспериментах Кормера с сотрудниками [27–29] в районе $P \sim 300$ ГПа был обнаружен значительный разрыв в P - ρ -траектории квазиизэнтропического сжатия водорода. В дальнейшем в развитие этих экспериментов на базе более совершенной методики генерации и диагностики квазиизэнтропического сжатия существование указанного разрыва было подтверждено и значительно уточнено [1–5] в несколько более низком диапазоне давления ($P \approx 150$ ГПа).

Одновременно в проводимых также во ВНИИЭФ экспериментах по «мягкому» электромагнитному сжатию водорода и дейтерия при температурах, близких к нулевой, была измерена их сжимаемость в области давлений до 500 ГПа [77] и зарегистрирован рост электропроводности плазмы водорода примерно на два порядка в узком диапазоне плотностей $\rho \sim 1.05$ – 1.15 г/см³ и давлений $P \sim 230$ – 300 ГПа [78]. Полученные в работах [77, 78] данные подкрепляются результатами *ab initio* моделирования низкотемпературных свойств водорода [79], согласно которым на изотерме $T = 100$ К молекулярный водород при $P \approx 350$ ГПа испытывает фазовое превращение в метастабильный проводящий «атомарный» кристаллический водород, что помимо скачка электропроводности сопровождается также слабым термодинамическим разрывом. Эти данные, на наш взгляд [80], можно рассматривать как низкотемпературную часть единой [1–5] аномалии термодинамики плотного водорода и дейтерия.

Что касается расчетно-теоретических подходов, то проблема существования в плотном водороде (дейтерии) особого диссоциативно-плазменного фазового перехода также имеет давнюю и богатую историю [53, 73–75]. На рис. 12 приведен один из множества модельных вариантов гипотетического «плазменного» фазового перехода [30] (см. подроб-

нее [73]). Диссоциативно-плазменный фазовый переход при давлении $P \sim 300$ – 400 ГПа присутствует также и в результатах расчетов энтропии сжатия дейтерия настоящей работы в рамках химической модели плазмы (код SANA), что проиллюстрировано на рис. 12, 15 и 18. В этом же диапазоне давлений обширный фазовый переход присутствует на «холодной кривой» (изотерме $T = 0$) в известном интерполяционном УРС SESAME [81] а также в полумпирических УРС ВНИИЭФ [82, 83]. Это показано на рис. 4 в работе [84].

Еще более непростым является взаимоотношение проблемы гипотетических диссоциативно-плазменных фазовых переходов, фиксируемых в реальном эксперименте [1–5, 27–29], с предсказаниями *ab initio* подходов типа QMD и WPMD-DFT, т. е. «экспериментов численных». Как можно видеть на рис. 12 и 18, на энтропах QMD и WPMD-DFT нет даже отдаленных признаков ни разрывов, ни каких-либо иных аномалий, подобных зафиксированным в экспериментах [1–5, 27–29]. Вместе с тем в течение уже двух десятков лет подходы QMD и PIMC [85] с нарастающей уверенностью предсказывают существование диссоциативно-плазменного фазового перехода в плотном и горячем водороде (дейтерии) и азоте в мегабарном диапазоне давлений и при температурах в несколько тысяч кельвинов (см., например, расчеты для азота [86] и обсуждение в работе [87]). Как подчеркивалось в работе [80], критическая точка этого фазового перехода, предсказываемого, например, в рамках *ab initio* подхода [88, 89] (с параметрами $P_c = 130$ ГПа, $\rho_c = 1.6$ г/см³, $T_c = 1400$ К) оказывается на P - ρ -плоскости практически в центре аномального разрыва плотности экспериментов [1–5] (см. рис. 12), а зона двухфазной области обсуждаемого фазового перехода [88, 89] на этой плоскости в диапазоне $P = 100$ – 300 ГПа практически совпадает с положением группы энтроп, реализуемых в настоящем и предшествующих [1–5] экспериментах. Детальное обсуждение указанного выше противоречия (см. подробнее [5, 52]) выходит за рамки целей настоящей работы, посвященной термодинамике дейтерия и гелия, прежде всего, в области высоких и сверхвысоких давлений $P = 5000$ – 20000 ГПа. В этом диапазоне давлений и плотностей настоящий и последние из предыдущих [1–5] экспериментов не фиксируют для плазмы дейтерия каких-либо заметных аномалий типа фазовых переходов.

Что касается плотной и горячей плазмы гелия, то для нее также неоднократно предсказывалась высокая вероятность существования резкого или даже скачкообразного сценария ионизации давлени-

ем. Так, в работе [54] предсказана возможность двухстадийного сценария с двумя последовательными «плазменными» фазовыми переходами движимыми (driven) первой и второй ионизацией гелия, что примерно согласуется с пересечением критических изохор $\rho \approx 2.2$ (8.7) г/см³ для первой (второй) стадии плазменного фазового перехода (с критическими параметрами $T_c \approx 35$ (120) кК, $P_c \approx 660$ (10000) ГПа, $n_c \approx 3.3$ (13) · 10²³ ядер/см³).

Для сравнения, другой вариант химической модели плазмы гелия [55] предсказывает одностадийную резкую, но непрерывную версию сразу двукратной ионизации давлением («кроссовер») при сжатии плазмы гелия до плотности 10 г/см³ и давления до 10000–20000 ГПа. Это в точности диапазон параметров, перекрытый в настоящих экспериментах. Приближенное положение обсуждаемых версий разрывного и непрерывного плазменных фазовых переходов отмечены на рис. 15 и 18. Следует подчеркнуть, что, как и в случае дейтерия, в случае гелия результаты *ab initio* QMD-расчетов энтропии гелия (см. рис. 15 и 18) не выявляют никаких аномалий, подтверждающих давние предсказания плазменных фазовых переходов как разрывного типа [54], так и типа кроссовера [55]. Расчеты же, использующие модель УРС и код SAHA, также не подтверждают предсказания работ [54, 55].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эксперименты по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия (водорода), представленные в настоящей и серии предыдущих работ, образуют обширную и цельную совокупность данных по УРС сильносжатой и разогретой плазмы дейтерия (водорода) и гелия, покрывающую широкую область фазовой диаграммы от суб- до мультимегабарных давлений и плотностей, в десятки раз превышающих нормальную плотность. Физически исследованная область охватывает состояния дейтерия (водорода) и гелия от плотного молекулярного флюида в случае дейтерия и плотного атомарного флюида в случае гелия до сильнонеидеальной и сильновырожденной плазмы. Для расширения исследуемой области параметров были проведены новые эксперименты с вновь разработанными двукаскадными устройствами сферической геометрии, где дейтериевая и гелиевая плазмы были сжаты до плотности $\rho \approx 14$ г/см³ и давления $P \approx 20000$ ГПа. Были проведены новые эксперименты в сферической геометрии

с использованием специально модифицированной конструкции взрывного генератора.

Таким образом, в лабораторных экспериментах по квазиизэнтропическому сжатию плазмы дейтерия и гелия достигнуты термодинамические параметры, превышающие предполагаемые значения в центре планет-гигантов солнечной системы — Юпитер и Сатурн (с давлением соответственно 60 и 20 млн. атмосфер), а также чрезвычайно многочисленного отряда так называемых внесолнечных планет с еще более высокими параметрами, во множестве открытых и активно изучаемых в последние десятилетия.

Результаты динамических экспериментов наглядно демонстрируют две особенности термодинамического поведения дейтерия (водорода) и гелия при квазиизэнтропическом сжатии в очень широком диапазоне давлений и плотностей: 1) вся совокупность экспериментальных данных в целом образует единую монотонно растущую зависимость; анализ данных, полученных в настоящем эксперименте, показывает, что в области давлений 5000–20000 ГПа не обнаружено существенного различия между квазиизэнтропической сжимаемостью дейтерия и гелия в координатах давление–плотность; 2) настоящие эксперименты не обнаруживают новых разрывных аномалий типа фазовых переходов первого рода в дейтерии, кроме зафиксированной ранее аномалии в области давлений $P \approx 150$ –300 ГПа и никаких разрывных аномалий типа фазовых переходов первого рода в плазме гелия.

В рамках теоретического сопровождения настоящих экспериментов были проведены развернутые расчеты термодинамики изэнтропического сжатия плотной горячей плазмы дейтерия и гелия. Помимо уже проводившихся ранее расчетов в рамках квазихимического представления (модель SAHA) и *ab initio* подхода квантовой молекулярной динамики, для осмысления результатов эксперимента на дейтерии были привлечены расчеты в другом *ab initio* подходе — методе молекулярной динамики с волновыми пакетами. Сравнение полученных экспериментальных данных с результатами модельных и *ab initio* теоретических расчетов параметров квазиизэнтропического сжатия показывает удовлетворительное согласие для параметров динамического сжатия (давление–плотность) как для дейтерия, так и для гелия. Теоретические расчеты с использованием модельного УРС SAHA предсказывают высокие степени кулоновской неидеальности $\Gamma_D \sim 200$ и вырождения электронов $n_e \lambda_e^3 \sim 150$ в достигнутых состояниях плазмы дейтерия и гелия, что находит свое

выражение в большом суммарном отталкивательном эффекте и превышении фактора сжимаемости плотной плазмы дейтерия и гелия над идеально-газовым значением. При этом расчетные параметры динамического сжатия (давление–плотность) дейтерия и гелия демонстрируют заметную близость, в целом соответствующую главному экспериментальному результату настоящей работы. Вместе с тем специально проведенные теоретические расчеты температуры изэнтропически сжимаемых дейтерия и гелия показывают существенное различие их термических параметров в рамках рассмотренных моделей.

Полученные результаты подчеркивают особую актуальность проведения новых дополнительных экспериментов по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия (водорода) с расширением диапазона достигаемых в эксперименте значений энтропии. Анализ разработанной методологии позволяет надеяться на возможность исследований квазиизэнтропической сжимаемости неидеальной плазмы дейтерия и гелия в РФЯЦ–ВНИИЭФ до давлений 25000 ГПа. В свою очередь, со стороны теории тщательный сравнительный анализ всего вышеуказанного круга вопросов заслуживает отдельного рассмотрения с участием, как модельных представлений, так и *ab initio* квантовых подходов.

Благодарности. Авторы выражают благодарность сотрудникам, принимавшим участие в организации, проведении экспериментов и обработке полученных данных: Р. В. Борисову, С. В. Елфимову, А. С. Пупкову, А. В. Романову, Д. П. Турутину, А. И. Гуркину, М. В. Логинову, Д. А. Линяеву, Г. С. Яндубаеву, В. В. Ерастову, В. В. Ковалдову.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Национального центра физики и математики, Минобрнауки России (в рамках соглашения с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 и программы по созданию молодежных лабораторий (научная тема «Газодинамика и физика взрыва»)), Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 19-32-90193, 20-02-00287), государственного задания (номер гос. регистрации ААА-А19-119071190040-5) и соглашения ФГУП «РФЯЦ–ВНИИЭФ»–ИПХФ РАН № 253/21.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. E. Fortov, R. I. Il'kaev, V. A. Arinin, V. V. Burzhev, V. A. Golubev, L. Iosilevskiy, V. V. Khrustalev, A. L. Mikhailov, M. A. Mochalov, V. Ya. Ternovoi,

and M. V. Zhernokletov, Phys. Rev. Lett. **99**, 185001 (2007).

2. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, С. К. Гришечкин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. К. Грязнов, Письма в ЖЭТФ **92**, 336 (2010).
3. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Е. А. Пронин, А. А. Юхимчук, ЖЭТФ **142**, 696 (2012).
4. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Раевский, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, А. И. Давыдов, Н. Н. Анашкин, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, Н. Б. Давыдов, В. А. Комраков, А. И. Логвинов, С. Ф. Маначкин, А. В. Рыжков, Б. И. Ткаченко, А. В. Федоров, С. А. Финюшин, Д. А. Калашников, Е. А. Чудаков, Е. А. Пронин, Е. А. Бакулина, ЖЭТФ **146**, 169 (2014).
5. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, А. О. Бликов, В. А. Огородников, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, ЖЭТФ **152**, 1113 (2017).
6. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Письма в ЖЭТФ **107**, 173 (2018).
7. М. В. Жерноклетов, В. А. Раевский, С. Ф. Маначкин, Н. Б. Давыдов, К. Н. Панов, А. В. Рыжков, В. А. Аринин, Б. И. Ткаченко, А. И. Логвинов, В. А. Комраков, А. И. Давыдов, Н. Н. Анашкин, ФГВ **54**(5), 13 (2018).
8. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **96**, 172 (2012).
9. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, А. В. Рыжков, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **101**, 575 (2015).
10. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, С. Е. Елфимов, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, ЖЭТФ **125**, 1113 (2017).

11. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, Письма в ЖЭТФ **108**, 692 (2018).
12. М. В. Жерноклетов, В. К. Грязнов, В. А. Аринин, В. Н. Бузин, Н. Б. Давыдов, Р. И. Илькаев, И. Л. Иосилевский, А. Л. Михайлов, М. Г. Новиков, В. В. Хрусталева, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ **96**, 479 (2012).
13. M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, V. E. Fortov, A. L. Mikhailov, V. A. Arinin, A. O. Blikov, V. A. Komrakov, I. P. Maksimkin, V. A. Ogorodnikov, and A. V. Ryzhkov, *J. Phys. Chem. Biophys.* **8**, (2018).
14. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, С. В. Ерунов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. А. Комраков, В. Г. Куделькин, И. П. Максимкин, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, П. Р. Левашов, Д. В. Минаков, М. А. Парамонов, ЖЭТФ **159**, 1118 (2021).
15. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov, D. I. Zenkov, and V. F. Tkachenko, in *11th IEEE Pulsed Power Conference/Digest of Technical Papers*, ed. by G. Cooperstein and I. Vitkovitsky (1997), p. 1669.
16. В. Ф. Басманов, В. С. Гордеев, А. В. Гришин, Н. В. Завьялов, Г. А. Мысков, С. Т. Назаренко, Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ **20**, 172 (2015).
17. А. О. Бликов, И. С. Калинин, В. А. Комраков, М. А. Мочалов, В. А. Огородников, А. В. Романов, Патент (RU) 2545289 C1, бюлл. №9, 27.03.2015; А. О. Бликов, А. Ю. Гусев, В. А. Комраков, А. В. Котин, Д. А. Линяев, М. А. Мочалов, В. А. Огородников, С. Н. Шошин, Патент (RU) 168263 U1, бюлл. №3, 25.01.2017.
18. A. N. Golubkov, A. A. Kononenko, and A. A. Yukhimchuk, *Fusion Sci. Techn.* **48**, 527 (2005).
19. A. Michels, W. De Graaff, T. Wassenaar, J. M. H. Levelt, and P. Louwerse, *Physica* **25**, 25 (1959).
20. В. В. Сычев, А. А. Вассерман, А. Д. Козлов, Г. А. Спиридонов, В. А. Цымарный, *Термодинамические свойства гелия*, Изд-во стандартов, Москва (1984).
21. O. T. Strand, D. R. Goosman, C. Martinez, T. L. Whitworth, and W. W. Kuhlrow, *Rev. Sci. Instrum.* **77**, 083108 (2006).
22. V. A. Arinin and V. I. Tkachenko, *Pattern Recognition and Image Analysis* **19**, 63 (2009).
23. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, ВАНТ, сер. Методики и программы числ. решения задач матем. физ. Вып. 3, 11 (1982).
24. В. П. Копышев, В. В. Хрусталева, ПМТФ **21**, 122 (1980).
25. В. П. Копышев, ПМТФ **12**, 119 (1971).
26. В. П. Копышев, В. П. Копышев, А. Б. Медведев, Препринт РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (1995), с. 58.
27. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, Письма в ЖЭТФ **16**, 286 (1972).
28. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, ЖЭТФ **69**, 743 (1975).
29. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, ЖЭТФ **75**, 1683 (1978).
30. D. Beule, W. Ebeling, A. Forster, H. Juraneck, R. Redmer, and G. Ropke, *Contrib. Plasma Phys.* **39**, 21 (1999).
31. V. S. Filinov, P. R. Levashov, A. V. Botsan, M. Bonitz, V. E. Fortov, *J. Phys. A* **42**, 214002 (2009); P. R. Levashov, V. S. Filinov, A. Botan, M. Bonitz, and V. E. Fortov, *J. Phys. Conf. Ser.* **121**, 012012 (2008).
32. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, *J. Phys.* **42**, 214007 (2009).
33. V. Gryaznov, I. Iosilevskiy, and V. Fortov, *Plasma Phys. Control. Fusion* **58**, 014012 (2015).
34. С. Г. Гришечкин, С. К. Груздев, В. К. Грязнов, М. В. Жерноклетов, Р. И. Илькаев, И. Л. Иосилевский, Г. Н. Кашинцева, С. И. Киришанов, С. Ф. Маначкин, В. Б. Минцев, А. Л. Михайлов, А. Б. Межевов, М. А. Мочалов, В. Е. Фортов, В. В. Хрусталева, А. Н. Шуйкин, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **80**, 452 (2004).
35. G.V.Boriskov, A.I.Bykov, R. I. Il'kaev, V. D. Selemir, G. V. Simakov, R. F. Trunin, V. D. Urlin, A. N. Shuikin, W. J. Nellis, *Phys. Rev. B* **71**, 092104 (2005).
36. Р. Ф. Трунин, Г. В. Борисков, А. И. Быков, Р. И. Илькаев, Г. В. Симаков, В. Д. Урлин, А. Н. Шуйкин, ЖТФ **76**, 90 (2006).
37. M. D. Knudson, D. L. Hanson, J. E. Bailey, C. A. Hall, J. R. Asay, and A. Deeney, *Phys. Rev. B* **69**, 144209 (2004).
38. P. Loubeyre, S. Brygoo, J. Eggert, R. M. Colliers, D. K. Spaulding, J. R. Rygg, T. R. Boehly, G. W. Collins, and R. Jeanloz, *Phys. Rev. B* **86**, 144115 (2012).

39. V. Gryaznov, S. Ayukov, V. Baturin, I. Iosilevskiy, A. Starostin, and V. Fortov, *J. Phys. A* **39**, 4459 (2006); V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, V. E. Fortov et al., *Contrib. Plasma Phys.* **53**, 392 (2013).
40. B. Militzer, D. Ceperley, J. D. Kress, J. D. Johnson, L. A. Collins, and S. Mazevet, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 275502 (2001).
41. E. S. Yakub, *Physica B* **265**, 31 (1999).
42. E. S. Yakub, *Low Temp. Phys.* **20**, 579 (1994).
43. B. Holst, R. Redmer, V. Gryaznov, V. Fortov, and I. Iosilevskiy, *Eur. Phys. J. D* **66**, 104 (2012).
44. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*. Под общей ред. В. Е. Фортова, том III-1 Физматлит, Москва (2004), с. 111.
45. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Н. И. Кузнецова, В. И. Кучеренко, Г. Б. Лаппо, Б. Н. Ломакин, Г. А. Павлов, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, *Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора*, под ред. В. М. Иевлева, Атомиздат, Москва (1980).
46. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, *Contrib. Plasma Phys.* **56**, 352 (2016).
47. P. Loubeyre, R. LeToullec, M. Hanfland, R. J. Hemley, and H. K. Mao, *Nature* **383**, 702 (1996).
48. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, *ПМТФ* **3**, 70 (1973).
49. I. Iosilevskiy, in *Physics of Extreme States of Matter*, ed. by V. Fortov et al. Russia, Chernogolovka; IPCP RAS (2013), p. 136, arXiv:1403.8053v3.
50. И. Л. Иосилевский, в *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, под ред. В. Е. Фортова, том III-1, Физматлит, Москва (2004), с. 349.
51. И. Иосилевский, *Физика неидеальных кулоновских систем: Уравнение состояния и фазовые переходы*, Saarbrücken, Germany, Lambert Acad. Publ. (2011).
52. I. L. Iosilevskiy, *J. Phys. Conf. Ser.* **653**, 012077 (2015).
53. В. Е. Фортов, *Термодинамика динамических воздействий на вещество*, Физматлит, Москва (2019).
54. В. Эбелинг, А. Фёрстер, В. Фортов, В. Грязнов, А. Полищук, *Теплофизические свойства горячей плотной плазмы*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, М.–Ижевск (2007).
55. C. Winisdörffer and G. Chabrier, *Phys. Rev. E* **71**, 026402 (2005).
56. И. Л. Иосилевский, *ТВТ* **18**, 447 (1980).
57. И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, *Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме*, Изд-во МФТИ, Москва (2000).
58. A. V. Chentsov and P. R. Levashov, *Contrib. Plasma Phys.* **52**, 33 (2012).
59. Ya. S. Lavrinenko, I. V. Morozov, and I. A. Valuev, *Contrib. Plasma Phys.* **59**, e201800179 (2019).
60. В. К. Грязнов, М. В. Жерноклетов, В. Н. Зубарев, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, *ЖЭТФ* **78**, 573 (1980).
61. *Теория неоднородного электронного газа*, под ред. С. Лундквиста, Н. Марча, Мир, Москва (1987).
62. R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge Univ. Press (2020).
63. S. J. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
64. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
65. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
66. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).
67. A. Becker, N. Nettelmann, B. Holst, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **88**, 045122 (2013).
68. D. Klakow, C. Töpffer, and P. G. Reinhard, *J. Chem. Phys.* **101**, 10766 (1994).
69. M. Knaup, P. G. Reinhard, C. Töpffer, and G. Zwicknagel, *J. Phys. A* **36**, 6165 (2003).
70. J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
71. Y. S. Lavrinenko, I. V. Morozov, and I. A. Valuev, *Contrib. Plasma Phys.* **56m** 448 (2016).
72. I. V. Morozov and I. A. Valuev, *Contrib. Plasma Phys.* **52**, 140 (2012).
73. В. Е. Фортов, *Физика высоких плотностей энергии*, Физматлит, Москва (2013).
74. В. Е. Фортов, *Уравнения состояния вещества: от идеального газа до кварк-глюонной плазмы*, Физматлит, Москва (2012).
75. V. E. Fortov and I. T. Iakubov, *Physics of Non-Ideal Plasma*, World Sci., Singapore–London–Hong Kong (2000).

- 76.** А. В. Бушман, Б. Н. Ломакин, В. А. Сеченов, И. Р. Шарипджанов, О. Е. Щекотов, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **69**, 1524 (1975).
- 77.** Г. В. Борисков, А. И. Быков, Н. И. Егоров, М. В. Жерноклетов, В. Н. Павлов, И. С. Стрелков, О. М. Сурдин, В.И.Тимарева, С. И. Белов, ЖЭТФ **157**, 221 (2020).
- 78.** G. V. Boriskov, S. I. Belov, A. I. Bykov, M. I. Dolotenko, N. I. Egorov, A. S. Korshunov, Yu. B. Kudakov, I. V. Makarov, V. D. Selemir, and A. V. Filippov, J. Low Temp. Phys. **159**, 307 (2010).
- 79.** И. М. Сайтов, Письма в ЖЭТФ **110**, 184 (2019).
- 80.** И. Л. Иосилевский, *Аномальная термодинамика и проблема фазовых переходов в плотном и горячем водороде (дейтерии)*, Межд. конференция «XXI Харитоновские тематические научные чтения», Россия, Саров, 15-19 апреля 2019 г. (пленарный доклад).
- 81.** G. I. Kerley, *Theoretical Equation of State for Deuterium*, LASL Sci. Report LA-4776 (1972).
- 82.** В. П. Копышев, В. Д. Урлин, в сб. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова, Наука, Москва (2000), с. 297.
- 83.** В. Д. Урлин, ЖЭТФ **144**, 957 (2013).
- 84.** S. I. Blinnikov, R. I. Il'kaev, M. A. Mochalov, A. L. Mikhailov, I. L. Iosilevskiy, A. V. Yudin, S. I. Glazyrin, A. A. Golubev, V. K. Gryaznov, and S. V. Fortova, Phys. Rev. E **99**, 033102 (2019),
- 85.** М. Бониц, И. А. Муленко, Е. Н. Олейникова, В. С. Филинов, В. Е. Фортов, А. Л. Хомкин, Физика плазмы **27**, 1085 (2001).
- 86.** K. P. Driver and B. Militzer, Phys. Rev. B **93**, 064101 (2016).
- 87.** G. Mazzola, R. Helled, and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **120**, 025701 (2018).
- 88.** W. Lorenzen, B. Holst, and R. Redmer, Phys. Rev. B **82**, 195107 (2010).
- 89.** M. A. Morales, C. Pierleoni, E. Schwegler, and D. M. Ceperley, Proc. Nat. Acad. Sci. **107**, 12799 (2010).