

**К ВОПРОСУ О РАСЧЕТЕ УДАРНЫХ АДИАБАТ
ДЛЯ ТВЕРДЫХ СРЕД В ОБЛАСТИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ**

С. В. Бобровский, В. М. Гоголев
(Ленинград)

Для изучения законов распространения ударных волн в твердых средах необходимо знание ударных адиабат этих веществ. В настоящее время с помощью динамических методов в лабораторных условиях были получены ударные волны в металлах и других твердых средах с давлением на фронте до величин порядка 10 Мбар. Для описания поведения твердых веществ при сверхвысоких давлениях, недоступных в настоящее время экспериментальному исследованию, может быть использована статистическая модель атома Томаса — Ферми.

В модели Томаса — Ферми твердая среда рассматривается как газ, состоящий из ядер и электронов. Ядра подчиняются статистике Больцмана и вносят свой вклад в полные давления и удельную тепловую энергию. Для вычисления электронных частей энергии и давления газ разбивается на атомные ячейки, каждая из которых содержит ядро с положительным зарядом z_e (e — заряд электрона) и z электронов. Для простоты ячейка считается сферической. Объем ее принимается равным среднему объему вещества, приходящемуся на одно ядро. Атомная ячейка в целом предполагается нейтральной с равномерно распределенным по объему электронным облаком. Между атомными ячейками не действуют силы сцепления, так что эта модель не описывает связи атомов в твердом теле. Ячейки оказывают друг на друга положительное давление, совпадающее с давлением электронного газа, т. е. модель описывает только силы отталкивания и тепловое давление. Поэтому модель дает разумные результаты либо при больших сжатиях, когда силы отталкивания преобладают над силами притяжения, либо при высоких температурах, когда силами сцепления можно пренебречь.

Общую внутреннюю энергию и давление можно представить в виде

$$\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_T + \varepsilon_e, \quad p = p_x + p_T + p_e, \quad (1)$$

где ε_x и p_x — энергия и давление холодного (упругого) сжатия; ε_T и p_T — слагаемые, отвечающие тепловому движению атомов (ядер); ε_e и p_e — слагаемые, соответствующие тепловому возбуждению электронов.

При больших сжатиях составляющие ε_x , ε_e , p_x и p_e описываются уравнениями модели атома Томаса — Ферми, которые были решены численно в работе Латтера [1]. Уравнения рассматриваемой модели допускают определенный характер подобия по отношению к числу электронов z . В соответствии с этим решением в [1] дано для приведенных величин:

$$\bar{p} = p z^{-10/3}, \quad \bar{V} = V z, \quad \bar{T} = T z^{-4/3}, \quad \bar{\varepsilon} = \varepsilon z^{-7/3}, \quad (2)$$

где p — давление; V — объем, приходящийся на один атом, см^3 ; T — температура; ϵ — энергия атома.

В настоящей работе производится построение ударных адиабат различных твердых сред с использованием модели атома Томаса — Ферми и рассматривается возможность экстраполяции этих результатов в область относительно малых давлений и сжатий.

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ ФОРМУЛЫ

Решение Латтера в [1] представлено в виде графиков. Для удобства расчета ударных адиабат целесообразно это решение аппроксимировать некоторыми аналитическими интерполяционными зависимостями.

Структура интерполяционных зависимостей при аппроксимации электронных частей энергии и давления выбиралась в соответствии с асимптотиками: при $V \rightarrow 0$ поведение электронов в ячейке описывалось неполностью вырожденным электронным газом, при $V \rightarrow \infty$ электронные ячейки описывались моделью идеального газа.

Соответствующие предельные соотношения [2, 3] с использованием приведенных величин (2) имеют вид:

при $\bar{V} \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}_e &= \frac{\beta}{2} (k \bar{T})^2 \bar{V}^{2/3} \text{ эрг}, \\ \bar{p}_e &= \frac{\beta}{3} (k \bar{T})^2 \bar{V}^{-1/3} \text{ дин/см}^2;\end{aligned}\quad (3)$$

при $\bar{V} \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}_e &= \frac{3}{2} (k \bar{T}), \\ \bar{p}_e &= \frac{k \bar{T}}{\bar{V}},\end{aligned}\quad (4)$$

где $\beta = 8,452 \cdot 10^{26} \text{ 1/эрг} \cdot \text{см}^2$; $k = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/град}$.

Путем соответствующего подбора вспомогательных функций результаты расчета Латтера для атома были аппроксимированы в виде:

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}_e &= \bar{p}_e \bar{V} \left\{ \frac{3}{2} + \frac{2,67 \cdot 10^7 [(k \bar{T})^{8/9} + 0,812] \bar{V}^{1/3}}{(k \bar{T})^{5/2} + 2,33 + 1,67 \cdot 10^{20} \bar{V} k \bar{T}} \right\}, \\ \bar{p}_e &= \frac{1,6 \cdot 10^{-12} (k \bar{T})^2}{2,21 \cdot 10^{-15} \bar{V}^{1/3} + \bar{V} k \bar{T}} \cdot \frac{1}{1 + \frac{1,8 \cdot 10^{-10} \bar{V}^{1/2}}{3,16 \cdot 10^{-21} + \bar{V} (k \bar{T})^{3/2}}}.\end{aligned}\quad (5)$$

Формулы (5) в предельных случаях удовлетворяют соотношениям (3) и (4).

Попрежность соотношений (5) в рабочем интервале температур и объемов атома ($10^3 \text{ эв} > kT > 10^{-2} \text{ эв}$; $10^{-20} \text{ см}^3 > \bar{V} > 10^{-23} \text{ см}^3$) не превышает 10%. Поскольку сама модель Томаса — Ферми является приближенной, достигнутая точность аппроксимаций может быть признана приемлемой для расчетов.

Результаты расчетов $\bar{p}_x$ и $\bar{\epsilon}_x$ были аппроксимированы зависимостями вида:

$$\bar{p}_x = \left(\sum_{i=0}^5 a_i \bar{V}^{\frac{i+5}{3}-1} \right), \quad \bar{\epsilon}_x = \left(\sum_{i=0}^5 b_i \bar{V}^{\frac{i+2}{3}-1} \right), \quad (6)$$

где $a_0=4,65 \cdot 10^{26}$; $a_1=9,43 \cdot 10^{33}$; $a_2=1,73 \cdot 10^{42}$; $a_3=-1,52 \cdot 10^{49}$; $a_4=1,73 \cdot 10^{56}$; $a_5=3,95 \cdot 10^{62}$; $b_0=3,10 \cdot 10^{26}$; $b_1=1,30 \cdot 10^{34}$; $b_2=1,33 \cdot 10^{42}$; $b_3=9,61 \cdot 10^{48}$; $b_4=2,17 \cdot 10^{55}$; $b_5=9,20 \cdot 10^{62}$.

Зависимости (6) удовлетворяют асимптотике [2, 3]:

при $\bar{V} \rightarrow 0$ $\bar{p}_x \sim \bar{V}^{-5/3}$, $\bar{\varepsilon}_x \sim \bar{V}^{-2/3}$; при $\bar{V} \rightarrow \infty$ $\bar{p}_x \sim \bar{V}^{-10/3}$, $\bar{\varepsilon}_x \sim \bar{V}^{-7/3}$.

Погрешность выражений (6) в интервале объемов $10^{-21} \text{ см}^3 > \bar{V} > 10^{-23} \text{ см}^3$ не превышает 10%.

Тепловые (ядерные) составляющие в (1) определяются из соотношений для идеального газа:

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_r &= \frac{3}{2} \bar{p}_r \cdot \bar{V}, \\ \bar{p}_r &= 1,6 \cdot 10^{-12} \frac{k \bar{T}}{\bar{V}} z^{-1}.\end{aligned}\quad (7)$$

РАСЧЕТ УДАРНЫХ АДИАБАТ МАТЕРИАЛОВ, СОСТОЯЩИХ ИЗ ОДИНАКОВЫХ АТОМОВ (МЕТАЛЛЫ)

Уравнение ударной адиабаты имеет вид

$$\varepsilon - \varepsilon_0 = \frac{1}{2} (p + p_0) (V_0 - V),$$

где ε и p определяются формулами (1); ε_0 , p_0 , V_0 — энергия, давление и объем, приходящиеся на один атом, в нормальных условиях.

Пренебрегая величинами ε_0 и p_0 , с помощью (2) и (7) это уравнение преобразуем к виду

$$\bar{\varepsilon}_x + \bar{\varepsilon}_e - \frac{1}{2} (\bar{p}_x + \bar{p}_e) (\bar{V}_e - \bar{V}) - 0,8 \cdot 10^{-12} z^{-1} k \bar{T} (\bar{V}_0 \cdot \bar{V}^{-1} - 4) = 0. \quad (8)$$

Начальный объем для одного атома в (8) определяется выражением

$$\bar{V}_0 = \frac{z M}{\rho_0 A},$$

где M — вес грамм-атома элемента, g ; ρ_0 — плотность в нормальных условиях, $g/\text{см}^3$; $A=6,023 \cdot 10^{23}$ — число Авогадро.

При больших сжатиях уравнение (8) совместно с зависимостями (5) — (7) определяет ударную адиабату, соответствующую модели атома Томаса — Ферми. При сравнительно малых сжатиях и давлениях, а также при малых значениях z (порядка единиц) модель атома Томаса — Ферми не применима, что связано с идеализацией физических предпосылок, положенных в основу этой модели.

На рис. 1 представлены результаты расчета ударных адиабат железа и свинца, а также экспериментальные данные по ударному сжатию этих материалов. Из рисунка видно, что взаимное расположение ударных адиабат хорошо соответствует экспериментальным данным. На рис. 2 в плоскости (скорость фронта волны — массовая скорость ча-

стиц на фронте) точками обозначены расчетные значения этих параметров на ударной адиабате. Левые графики рис. 2 соответствуют параметрам адиабат до достижения максимального сжатия, правые — после достижения максимального сжатия. Из рисунка видно, что оба

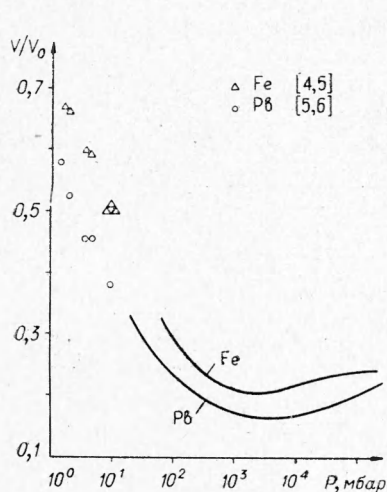


Рис. 1.

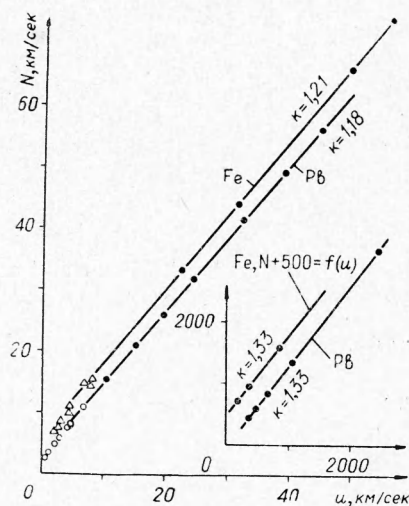


Рис. 2.

участка ударных адиабат достаточно хорошо описываются линейными зависимостями вида

$$N = c + ku, \quad (9)$$

где c и k — постоянные, характеризующие некоторую скорость звука и наклон адиабаты. Наклон первого участка адиабаты близок к величине $k \approx 1.2$. С увеличением давления наклон адиабат увеличивается, приближаясь к предельному значению $k = 4/3$.

Экстраполяция зависимости (9) в область малых давлений при значениях коэффициентов c и k , определенных по расчетным значениям N и u в области сжатий $4 \leq \frac{V_0}{V} < \left(\frac{V_0}{V}\right)_{\max}$ показывает хорошее согласие этой зависимости с экспериментальными данными.

Аналогичный расчет ударных адиабат был выполнен для калия, натрия, урана и алюминия. Результаты расчета показали следующее.

С увеличением давления степень сжатия вещества сначала увеличивается, затем опять начинает уменьшаться, асимптотически приближаясь к величине $\frac{V_0}{V} = 4$. Последняя оценка следует и непосредственно из уравнений (5) и (8) при $T \rightarrow \infty$.

Максимальное сжатие различных веществ различно. При этом оно возрастает с увеличением числа z и уменьшением начальной плотности. Степень максимального сжатия рассмотренных материалов изменялась в пределах $\frac{V_0}{V} = 4.5 - 6.0$. Чем выше начальная плотность вещества, тем при больших давлениях достигается его максимальное сжатие.

Экстраполяция результатов расчета в область малых давлений с помощью зависимости (9) для большинства материалов приводит к хорошему согласию с экспериментом. Исключение составляет алюминий, у которого расчетная адиабата не согласуется с экспериментальными данными работ [5, 7], хотя она и находится в соответствии с некоторыми другими результатами [8].

Расчет ударных адиабат с помощью модели атома Томаса — Ферми, вообще говоря, справедлив только в области больших сжатий. Однако анализ полученных данных показал, что результаты расчета в первом приближении могут быть использованы, если использовать экстраполяцию в виде (9), и для описания ударных адиабат в промежуточной области (между областью эксперимента и расчета) до относительных сжатий порядка 1,7.

РАСЧЕТ УДАРНЫХ АДИАБАТ МАТЕРИАЛОВ, СОСТОЯЩИХ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ АТОМОВ

Большинство естественных минералов и горных пород состоит из различных молекул и атомов. Для приближенного расчета ударных адиабат этих материалов можно использовать два подхода: метод построения адиабат с учетом индивидуальных свойств атомов, входящих в состав данного вещества (назовем его методом суперпозиции объемов) и метод сведения данного химического соединения к фиктивному элементу той же плотности с некоторыми средними значениями чисел z и M (метод осреднения).

В методе суперпозиции построение ударной адиабаты некоторого химического соединения основано на использовании ударных адиабат отдельных химических элементов, входящих в рассматриваемое вещество. Если известны начальные объемы и ударные адиабаты составных элементов, входящих в единицу объема, то можно найти и общее сжатие вещества для заданного давления, т. е. построить искомую ударную адиабату.

Основная принципиальная трудность этого метода заключается в том, что связанные атомы (т. е. в составе химического соединения) обычно занимают существенно меньший объем, чем в том случае, если бы вещество состояло из одних атомов, причем начальные объемы различных атомов в соединении не известны. В связи с этим необходимо смесь из атомов с общим весом, равным плотности рассматриваемого вещества, каким-то образом предварительно поджать так, чтобы общий объем этих атомов был равен 1 см^3 . Один из возможных способов предварительного уплотнения смеси из различных атомов состоит в том, что сжатие отдельных атомов производится в соответствии с их кривыми холодного сжатия. На основании этой гипотезы начальные объемы отдельных атомов сжимаются в соответствии с кривыми холодного сжатия до таких размеров, чтобы их общий объем был равен 1 см^3 , а плотность и процентное содержание по весу соответствовали рассматриваемому материалу. При этом давление должно быть одинаковым для всех сортов атомов.

В методе осреднения естественно определить средние величины атомных номеров z и атомных весов M следующими соотношениями:

$$\bar{z} = \frac{\sum n_i z_i}{\sum n_i} = \frac{\sum \frac{z_i \bar{v}_i}{M_i}}{\sum \frac{\bar{v}_i}{M_i}},$$

$$\bar{M} = \frac{\sum n_i M_i}{\sum n_i} = \frac{1}{\sum \frac{\delta_i}{M_i}}, \quad (10)$$

где $n_i = \frac{A \delta_i \rho_0}{M_i}$ — количество атомов i -го элемента в 1 см³; δ_i — весовая доля атомов i -го элемента в веществе.

На рис. 3 и 4 представлены результаты расчета ударных адиабат

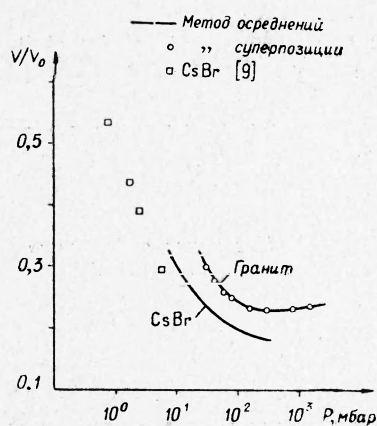


Рис. 3.

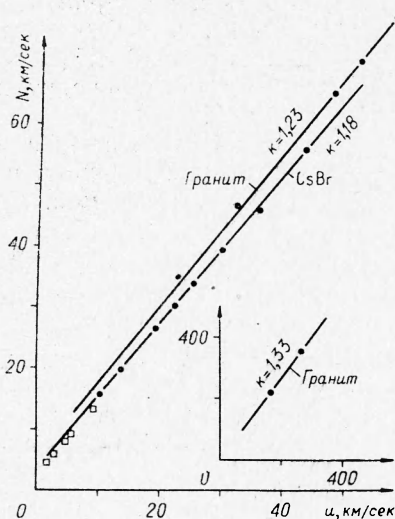


Рис. 4.

бромистого цезия и гранита ($\rho_0 = 2,57 \text{ г/см}^3$, $\bar{z} = 10$, $\bar{M} = 20$). Для построения ударной адиабаты гранита были использованы оба рассмотренных метода. Из рис. 3 видно, что метод суперпозиций и метод осреднений приводят к практически одинаковым результатам. Поэтому для расчета ударных адиабат химических соединений можно рекомендовать метод осреднений как более простой при использовании.

На рис. 4 показана экстраполяция расчетных адиабат в область эксперимента. Экстраполяция производилась по тому же методу, что и для металлов. Из рисунка видно, что используемый способ экстраполяции расчетных адиабат приводит к хорошему соответствию с экспериментом в области относительно высоких давлений и сжатий (примерно до относительных сжатий 1,9).

Для выяснения влияния небольших изменений чисел z был произведен расчет ударных адиабат гранита при различных значениях z , изменяющихся от 7 до 15, и $M = 2z$. Расчеты показали, что изменение z в указанных пределах слабо влияет на характер ударной адиабаты. Например, при заданном значении давления скорость фронта ударной волны изменялась (убывала с ростом z) не более чем на 2%. В то же время изменение начальной плотности оказывает на результаты расчета более существенное влияние. Изменение начальной плотности от 0,97 до 2,70 г/см³ при $M = 2z = 20$ привело к уменьшению скорости фронта примерно на 40%.

* * *

Таким образом, рассмотренные выше результаты исследования ударных адиабат в области высоких давлений с помощью модели атома Томаса — Ферми позволяют сделать следующие выводы.

С увеличением давления степень сжатия вещества сначала увеличивается, а затем уменьшается, асимптотически приближаясь к величине $\frac{V_0}{V} = 4$; причем максимальное сжатие возрастает с увеличением числа и уменьшением начальной плотности. С увеличением начальной плотности максимальное сжатие вещества достигается при больших давлениях.

Ударные адиабаты достаточно хорошо описываются линейными зависимостями вида $N = c + ki$, причем для сжатий меньше максимального $k \approx 1,2$, а при сжатиях больше максимального $k \approx 4/3$.

Экстраполяция результатов расчета в область эксперимента в виде линейной зависимости приводит к хорошему согласию с экспериментальными точками.

Модель атома Томаса — Ферми может быть применена не только к однородным, но и к сложным по молекулярному составу средам, состоящим из различных атомов.

Поступила в редакцию
27/VI 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Latter. Phys. Rev., 1955, **99**, 6.
2. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Физматгиз, 1963.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. Гостехиздат, 1951.
4. К. К. Крупников, А. А. Баканова и др. Докл. АН СССР, 1963, **148**, 6.
5. Л. В. Альтшулер, С. Б. Кормер и др. ЖЭТФ, 1960, **38**, 3.
6. Л. В. Альтшулер, А. А. Баканова, Р. Ф. Трунин. ЖЭТФ, 1962, **42**, 1.
7. С. Б. Кормер, А. И. Фунтиков и др. ЖЭТФ, 1962, **42**, 3.
8. L. C. Skidmore, E. Morris. Thermodynamics of Nuclear Materials. Proceedings of Symposium, Vienna, 1962.
9. С. Б. Кормер, М. В. Синицин и др. ЖЭТФ, 1964, **47**, 4(10).