

Общим выводом из приведенных оценок можно считать значительно большую перспективность применения систем линий с распределенными параметрами по сравнению с другими рассмотренными схемами.

Поступила 10 II 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Андерсон Г., Нейлсон Ф. Применение понятия «Интеграл действия» в исследованиях взрывающейся проволоки. — В кн.: Взрывающиеся проволоки. М., ИИ, 1963.
2. Бакулин Ю. Д., Куропатенко В. Ф., Лучинский А. В. Магнитогидродинамический расчет взрывающихся проводников. — ЖТФ, 1976, т. 46, вып. 9.
3. Prestwich K. R. Harp, a short pulse, high current electron beam accelerator. — IEEE Transactions on Nuclear Science, 1975, vol. NS—22, N 3.

УДК 536.74

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДА ДО 10 МБАР

В. П. Копышев, В. В. Хрусталева

(Москва)

Проблема расчета уравнения состояния водорода в ее точной постановке неразрешима современными методами, поэтому приходится прибегать к физическим моделям или формальным интерполяциям. Одна из таких моделей, модель сжимаемого коволюма (МСК), сформулирована (под другим названием) в [1].

«Коволюм» V^0 (функция от давления p) — синоним понятия «упругий объем» из [1]. В данной работе МСК обобщается на случай неидеальной плазмы, строятся коволюмы молекулярной и атомарной фаз водорода (в основном на базе экспериментальных данных) и рассчитывается полное уравнение состояния водорода до давления 10 Мбар в области температур T выше 100 К при $p < 10$ кбар и выше дебаевской температуры $\Theta(p)$ при $p > 10$ кбар.

Предполагая известными результаты и обозначения работы [1], отметим здесь только обобщение на случай плазмы. Имеется пять сортов частиц, различаемых индексом n : молекулы H_2 ($n = m$), атомы H ($n = a$), ионы H_2^+ ($n = i$), протоны H^+ ($n = p$) и электроны e ($n = e$); α_n — концентрации частиц, $V_n^0(p)$ — коволюмы. Для молекул и атомов коволюмы отождествляются с нулевыми изотермами ($T = 0$) соответствующих фаз. По оценкам работы [2] кулоновское поле заряженных частиц сильно экранирует само себя, и им можно пренебречь.

Электроны образуются в результате ионизации атомов или молекул. Строго говоря, само понятие ионизации становится неопределенным, когда частицам «тесно», скорее, следовало бы говорить о возбуждении электронов, о снятии их вырождения. С другой стороны, вырождение возбужденных электронов проявляется в том, что они при понижении температуры «салятся» на орбиты вокруг протонов или ионов, образуя нейтральные атомы или молекулы. По основной идее аддитивности свободного и упругого объемов [1] эти свойства опишем тем, что к свободному объему $\alpha_p RT/p$ электронов, образовавшихся в реакции $H = H^+ + e$, прибавим упругий объем $\alpha_p V_a^0(p)$. При высоких температурах вырождения нет и существенно только первое слагаемое; при низких — наступает полное

вырождение и существенно только второе слагаемое. Аналогично для реакции $H_2 = H_2^- + e$ к $\alpha_i RT/p$ прибавим $\alpha_i V_m^0(p)$. По закону сохранения заряда $\alpha_p + \alpha_i = \alpha_e$.

Будем считать, что в уравнениях из [1] идеальный газ электронов («ионизованных» или «возбужденных») описывается по Максвеллу — Больцману. Тогда вид уравнений МСК остается неизменным и в случае плазмы, если формально доопределить коволюмы заряженных частиц: $V_p^0 = V_a^0$, $V_i^0 = V_m^0$, $V_e^0 = 0$.

Нулевые изотермы молекулярной и атомарной фаз построим, опираясь в основном на экспериментальные данные [3, 4] по почти адиабатическим сжатиям водорода в области 0,4—8 Мбар, в которых вклад в давление от разогрева оценивается в 20—30%.

В [4] предложено полное уравнение состояния в аналитической форме для молекулярной фазы и, в частности, выделена нулевая изотерма. Однако в формулах для тепловой энергии там не учтен член, описывающий внутренние степени свободы молекул (вращательные и колебательные). После его добавления получается (из условия воспроизведения зависимости между плотностью ρ , давлением p и энергией E в рабочей области) подправленная нулевая изотерма, которая хорошо описывается при $p > 0,1$ Мбар интерполяционной формулой

$$(1) \quad E_m^0 = 144,5\rho^2 - 3,68, \text{ кДж/г.}$$

При меньших давлениях нулевая изотерма задавалась таблично (из условия описания других экспериментов, см. ниже).

В [3] на графике представлена также наиболее вероятная нулевая изотерма атомарной фазы в области 2,8—10 Мбар. Она удовлетворительно описывается интерполяционной формулой

$$(2) \quad p_a^0 = 1,27\rho^3, \text{ Мбар.}$$

Здесь нельзя не отметить работу [5] по прецизионному расчету нулевой изотермы атомарной (металлической) фазы водорода. Расчетная изотерма заметно жестче, чем (2), из-за чего в работе [5] высказано сомнение в достоверности эксперимента. На наш взгляд, такое заключение является преждевременным. Напомним, что в расчетах оптимальная структура твердой металлической фазы оказалась анизотропной. В работе [6] приведены достаточно убедительные доводы в пользу неустойчивости таких структур, в пользу жидкого состояния уже при $T = 0$. Достаточно предположить, что именно эта возможность реализуется при $T = 0$ (или даже при небольших $T > 0$), и возражение против (2) снимается. Анизотропная структура содержит пустоты, а в жидком состоянии атомы более равномерно распределяются по пространству. Это может привести к повышению плотности жидкости при том же давлении (аналог — лед и вода). Не является ли в данном случае эксперимент отражением именно этого факта?!

Проведем еще некоторые оценки. Напомним теоретическую асимптотику при $\rho \rightarrow \infty$, которая получается в предположении, что электроны равномерно распределены по пространству (в дальнейших рассуждениях сохраним это предположение):

$$(3) \quad E_a^0 = A/r^2 - B/r, \text{ Ридб/атом,}$$

где r — радиус ячейки Вигнера — Зейтца в а. е. Первое слагаемое в (3) — кинетическая энергия, $A = 2,210$. Во второе дают вклад энергия обменного взаимодействия электронов ($B_{ex} = 0,916$) и электростатическая энергия Маделунга ($B_{es} \approx 1,8$), которая слабо зависит от структуры решетки. Ее значение можно получить и так. Представим себе, что водород состоит

из независимых сферических ячеек с равномерно распределенным отрицательным зарядом (фоном) и протоном в центре. Тогда электростатическая энергия ячейки точно равна $(B_{ep} + B_{ee})/r$, где $B_{ep} = 3$ — вклад от взаимодействия протона с фоном, $B_{ee} = -6/5$ — вклад от взаимодействия фона с самим собой, так что $B_{es} \approx B_{ep} + B_{ee} = 1,8$, и в (3) $B = 2,716$. Заметим, что как расчетная кривая из [5], так и все другие расчетные кривые, цитированные в этой работе, незначительно отличаются от (3) в области $p > 3$ Мбар.

Теперь подойдем к оценке нулевой изотермы с другой стороны, от малых плотностей. Считаем, что каждый электрон сильно связан со своим ядром, атомы сферически симметричны. Тогда в каждом атоме размытому электрону не с чем взаимодействовать, как только со своим протоном. Снова получается формула вида (3), но теперь $B = B_{ep} = 3$. Новое значение B отличается от старого всего на 10%, но этого оказывается достаточно, чтобы нулевая изотерма стала даже несколько мягче, чем экспериментальная (2). Эти оценки показывают, что в (2) нет ничего аномального. При $p = 0$ и $B = 3$ получаем $E_a^0 = -1,02$, что также разумно. Для простоты положим $B = 2\sqrt{A} = 2,973$, после чего $E_a^0 = -1$ при $p = 0$, и точно выполняется теорема вириала: $3pV = 2(A/r^2) + (-2\sqrt{A}/r)$. Окончательно принимаем для атомарной фазы

$$(4) \quad E_a^0 = A/r^2 - 2\sqrt{A}/r + \Delta E,$$

где константа $\Delta E = 1,1645$ (сумма потенциала ионизации атома и половины энергии диссоциации молекулы) введена для согласования начал отсчета энергии в (4), (1).

Согласно (1), (4), равновесие молекулярной и атомарной фаз при $T = 0$ имеет место в области $1,15 \leq \rho \leq 1,61$ г/см³ при $p = p_* = 4,40$ Мбар. Вообще говоря, p_* зависит от температуры, и оно весьма чувствительно к нюансам уравнений состояния фаз.

МСК не описывает квантовых явлений при температурах T ниже дебаевской Θ . Оценим ее. По модели Дебая квантовые явления несущественны при $T > \Theta$, причем при $T = \Theta$ энтропия S (в единицах постоянной Больцмана k на частицу, т. е. молекулу или атом) равна приблизительно 4. Назовем дебаевской температурой такую, при которой $S = 4$. В МСК для степеней свободы центров тяжести частиц

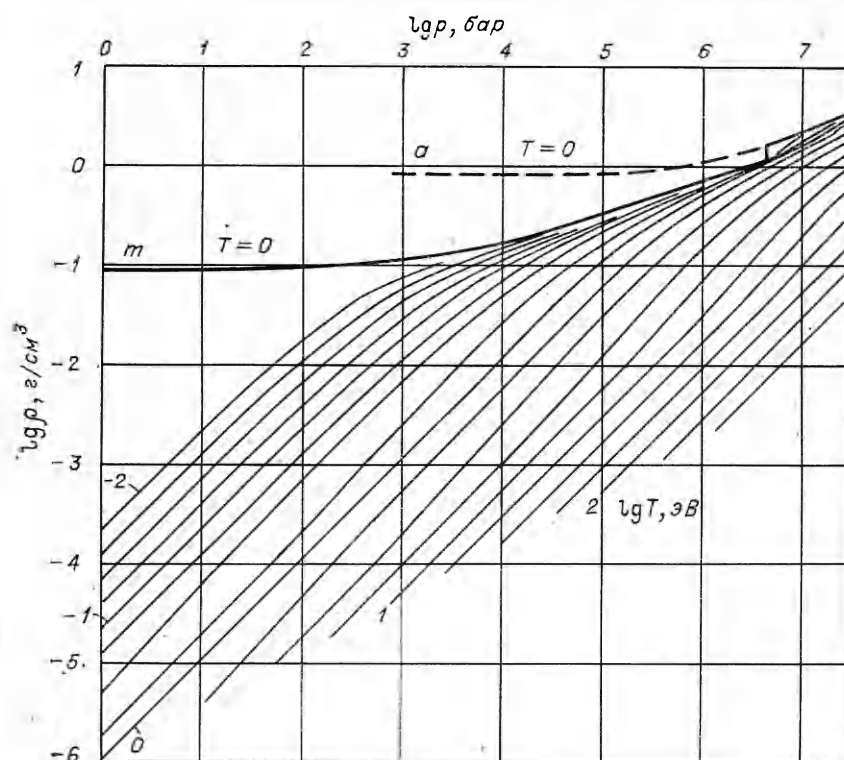
$$(5) \quad S(T, p) = \frac{5}{2} + \ln \frac{kT}{p\lambda^3},$$

где λ — тепловая длина волны де-Бройля. Полагая в (5) $S = 4$, $T = \Theta$, получим

$$\Theta = Cp^{2/5},$$

где p , Мбар, Θ , K , $C = 1300$ для молекулярной фазы, $C = 2000$ — для атомарной.

Обычно диссоциацию молекул в идеальном газе называют «диссоциацией температурой», а превращение молекулярной фазы в атомарную на нулевой изотерме — «диссоциацией давлением». МСК объединяет оба вида диссоциации в единое целое при любых температурах и давлениях. Уравнения для равновесных концентраций имеют вид обычных уравнений Саха, только в отличие от случая идеального газа константы равновесия дополнительно умножаются на факторы вида $\exp(-\Delta\Phi^0(p)/kT)$, где $\Delta\Phi^0$ — изменение коволюмного химического потенциала в заданной реакции. Например, при образовании двух атомов из одной молекулы $\Delta\Phi^0 = 2\Phi_a^0 - \Phi_m^0$. Этот сдвиг можно формально истолковать как изменение энергии диссоциации молекулы, зависящее от давления.



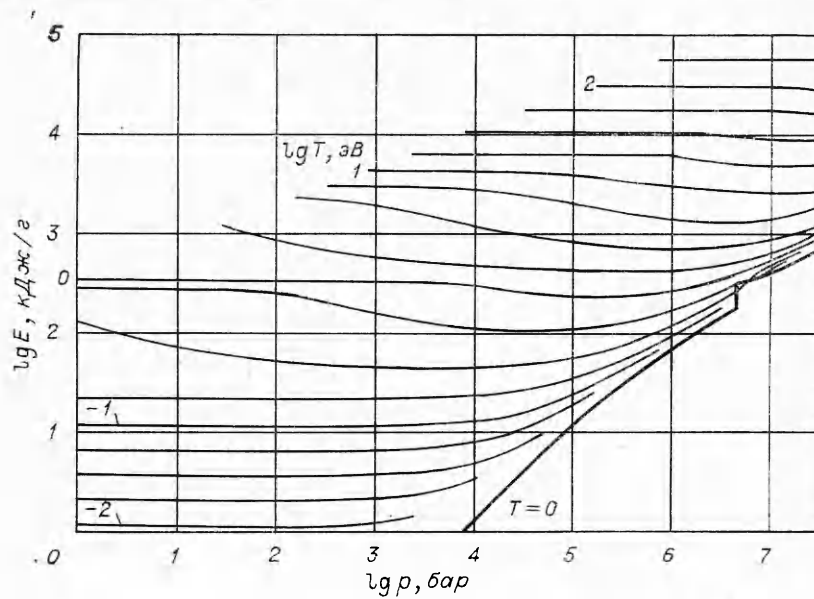
Ф и г. 1

Ясно, что при достаточно высокой температуре вещество однородно, т. е. состоит из компонентов, которые не разделены в пространстве на фазы. С другой стороны, при абсолютном нуле (и вблизи него) есть область сосуществования двух фаз — молекулярной и атомарной. Следовательно, где-то при «средней» температуре должна существовать критическая точка. МСК при $T > 0$ не описывает двухфазных состояний в принципе, она существенно «надкритична». Тем не менее при понижении температуры изотермы приобретают (под влиянием вклада нулевых изотерм) характерный перегиб, какой имеет место вблизи критической точки. Если перегиб выражен резко, то его влияние на адиабату Пуассона почти не отличимо от влияния фазового перехода первого рода.

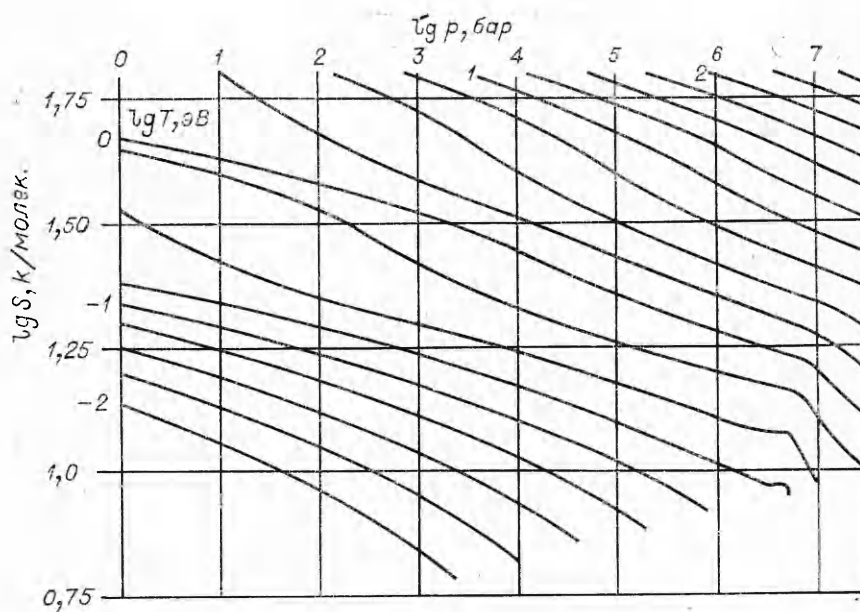
Результаты расчета термодинамических величин представлены на фиг. 1—3 в виде изотерм. Всюду нанесены не сами величины, а их десятичные логарифмы. Разность $\lg T$ на двух соседних изотермах равна 0,25; максимальный диапазон изменения T от 0,01 эВ ($\lg T = -2$) до 316 эВ ($\lg T = 2,5$).

Вторая независимая переменная (давление p) изменяется от 1 бар до 30 Мбар. Заметим, что плотноупакованным сферам, имеющим радиус 1 Бор, соответствует плотность 2 г/см³ и давление 8 Мбар, так что при $p \leq 10$ Мбар атомы (и молекулы) еще достаточно индивидуальны (не раздавлены, а только несколько сжаты). При $p > 10$ Мбар характерным параметром для электронного возбуждения будет уже не потенциал ионизации, а энергия Ферми. Поэтому давление 10 Мбар является грубой оценкой границы применимости МСК для плазмы.

Нулевая изотерма молекулярной фазы выбрана до 25 кбар экспериментальная [7], а далее проведена графическая интерполяция до 100 кбар.



Фиг. 2



Фиг. 3

Таблица 1

p , кбар	V_m^0 , см ³ /моль	p , кбар	V_m^0 , см ³ /моль	p , кбар	V_m^0 , см ³ /моль
0,5	16,17	3,0	14,97	5,5	13,75
1,0	16,05	3,5	14,71	6,0	13,54
1,5	15,81	4,0	14,45	6,5	13,33
2,0	15,54	4,5	14,20	7,0	13,14
2,5	15,26	5,0	13,97		

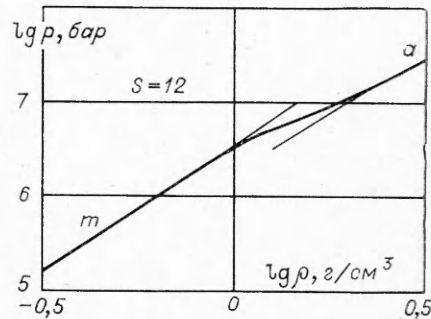
Таблица 2

p , Мбар	V_0 , см ³ /моль	V , см ³ /моль	T , К	E , кДж/моль	S , к/молек.	α_m
0,0395	10,5±0,3	10,8	1200	34	11,4	1,000
0,21	7,0±0,4	6,80	5000	178	15,8	0,975
0,86	3,4±0,8	3,67	7200	346	16,5	0,887

С таким коволюмом МСК воспроизводит известные экспериментальные данные по статическому сжатию до 7 кбар при $T = 25-150^\circ\text{C}$ [8] и по ударному сжатию до ~ 40 кбар [9] с ошибкой, не превышающей 5% для плотности при заданном давлении. Заметим, что статические данные [8] воспроизводятся с очень малой ошибкой ($< 0,5\%$), если коволюм задать табл. 1.

Далее, имеются эксперименты [10] по однократному и двукратному ударному сжатию жидкого дейтерия до 210 ± 10 и 860 ± 50 кбар соответственно. Расчеты по МСК с нулевыми изотермами (1), (4) согласуются с опытом в пределах ошибки измерений. В табл. 2 приведены расчетные параметры для состояний на фронте в трех ударных волнах, а также для сравнения экспериментальные значения удельного объема V_0 .

По нашим оценкам, рабочей области в экспериментах [3, 4] соответствует энтропия S , равная приблизительно 12 на молекулу. Эта изэнтропа представлена на фиг. 4, на ней выявлен перегиб, обусловленный диссоциацией молекул на атомы. Тонкими линиями намечены изэнтропы в чисто молекулярной и чисто атомарной фазах. При достаточно низкой температуре диссоциация приводит к «смягчению» адиабат Пуассона за счет образования атомов, и адиабаты с $S < 12$ частично уходят под нулевую изотерму $\rho_m^0(p)$ при $p < p_*$. Начало диссоциации (аномалии) на адиабате $S = 12$ снижается к ~ 3 Мбар в согласии с выводами авторов экспериментов. Заметим, что построение диаграмм равновесия между чисто молекулярной и чисто атомарной фазами (каждая по МСК) приводит к повышению p_* с ростом температуры и двухфазная область на изэнтропе $S = 12$ почти изобара $p = 5,4$ Мбар и почти изотерма $T = 0,41$ эВ.



Фиг. 4

Поступила 16 X 1978

ЛИТЕРАТУРА

1. Копышев В. П. Термодинамическая модель плотной жидкости.— ПМТФ, 1971, № 1.
2. Копышев В. П. Второй вириальный коэффициент плазмы.— ЖЭТФ, 1968, т. 55, № 10.
3. Григорьев Ф. В., Корнер С. Б., Михайлова О. Л., Толочко А. П., Урлин В. Д. Экспериментальное определение сжимаемости водорода при плотностях 0,5–2 г/см³. Металлизация водорода.— Письма в ЖЭТФ, 1972, т. 16, № 5.
4. Григорьев Ф. В., Корнер С. Б., Михайлова О. Л., Толочко А. П., Урлин В. Д. Уравнение состояния молекулярной фазы водорода в твердом и жидком состояниях при высоком давлении.— ЖЭТФ, 1975, т. 69, № 2 (8).

5. Каган Ю., Пушкарев В. В., Холас А. Уравнение состояния металлической фазы водорода.— ЖЭТФ, 1977, т. 73, № 3 (9).
6. Бровман Е. Г., Каган Ю., Холас А. Свойства металлического водорода под давлением.— ЖЭТФ, 1972, т. 62, №4.
7. Anderson M. S., Swenson C. A. Experimental compressions for normal hydrogen and normal deuterium to 25 kbar at 4,2 K.— Phys. Rev. B, 1974, vol. 10, N 12.
8. Циклис Д. С. Плотные газы. М., Химия, 1977.
9. Thiel M. van, Alder B. J. Shock compression of liquid hydrogen.— Molec. Phys., 1966, vol. 10, N 5.
10. Thiel M. van, Ross M. et al. Shock-wave compression of liquid deuterium to 0,9 Mbar.— Phys. Rev. Letters, 1973, vol. 31, N 16.

УДК 532.593

РАСЧЕТЫ МОЩНОГО ПОДВОДНОГО ВЗРЫВА С УЧЕТОМ ИСПАРЕНИЯ ПО ОБОБЩЕННОМУ УРАВНЕНИЮ СОСТОЯНИЯ ВОДЫ

Л. В. Альтшулер, Б. С. Кругликов, И. И. Шарипджанов
(Москва)

Сложность теоретического исследования мощных подводных взрывов главным образом связана с тем, что по оценкам [1] в начальный момент достигаются гигантские давления в 10^{10} бар и температуры в десятки миллионов градусов. В результате при последующем расширении образуется большой пузырь, наполненный водой в газообразном состоянии и окруженный концентрическим двухфазным слоем жидкость—пар. В то же время при взрывах химических ВВ образуется полость, содержащая в основном несконденсировавшиеся продукты взрыва, для которых нетрудно подобрать адекватные уравнения состояния, пригодные для расчета действия взрыва [2—4]. Для того чтобы учесть в расчетах мощного подводного взрыва специфику явления, связанную с испарением, диссоциацией воды и ионизацией ее составляющих, необходимо применение уравнения состояния воды в широком диапазоне изменения термодинамических параметров.

Достаточно реалистическая модель расчета мощного подводного взрыва построена в работе [5], где использовано уравнение состояния воды, описывающее всю область, охваченную ударной волной, и проведено единое рассмотрение процесса развития взрыва, но расчеты проведены для начальной стадии образования двухфазной области, причем эффекты испарения в явном виде не выявлены и не проанализированы.

В данной работе детально представлены результаты [6] по расчету методом конечных разностей мощного подводного взрыва с использованием уравнения состояния воды, разработанного одним из авторов настоящей работы [7]. Уравнение задано в аналитическом виде и описывает весь диапазон изменения термодинамических параметров, необходимый для проведения таких расчетов. Особенно детально рассчитана «ближняя» зона высокоэнтропийных состояний, определяющая объем образовавшегося пара, а также плазмы, т. е. размеры пузыря в различные моменты времени.

1. Постановка задачи. Задача о движении воды в результате действия взрыва решается в одномерном приближении в случае сферической симметрии. В переменных Лагранжа уравнения гидродинамики для движения среды можно представить в виде

$$(1.1) \quad \begin{aligned} u &= \partial R / \partial t, \quad \partial u / \partial t = -V \partial (p + q) / \partial R, \\ V/v &= \partial R^3 / \partial r^3, \quad T \partial S / \partial t = -q \partial V / \partial t, \end{aligned}$$

где t — время; r — радиальная координата частицы жидкости при $t = 0$; $R(r, t)$ — радиальная координата этой частицы жидкости в момент времени t ; V — удельный объем; v — его значение при $t = 0$; u — скорость; p — давление; S — энтропия на единицу массы; T — температура;