



# Исследования уравнений состояния вещества в экстремальных условиях

И.В. Ломоносов  
ИПХФ РАН, Черноголовка

Совещание "Исследования в области физики высоких плотностей энергии лазерными и электрофизическими методами», ИПФ РАН, Нижний Новгород, 02-03.04.2017

1. Мотивация
2. Определение УРС, проблема УРС вещества в экстремальных условиях
3. Эксперименты, теории – самосогласованное описание на примере УРС алюминия
4. Лазерные эксперименты по исследованиям УРС веществ
5. Выводы

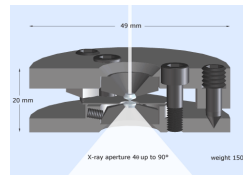
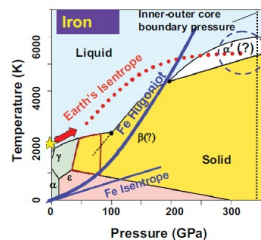
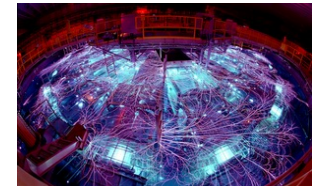
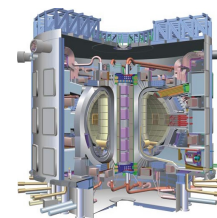
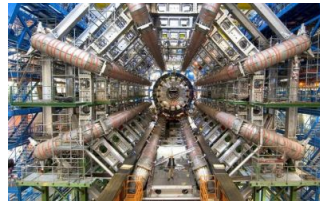
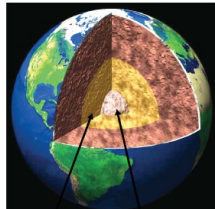
# Мотивация

## Экстремальные состояния вещества

- Физико-химические процессы при экстремальных условиях – мощное импульсное энерговыделение, сложный 3-х мерный характер, большие градиенты параметров течения (давление, плотность, т.п.)
- Физико-химические превращения, различные агрегатные состояния вещества
- Численное моделирование: обработка экспериментов, прогностические расчеты
- Модели свойств замыкают систему уравнений и определяют достоверность и точность результатов численного моделирования

## Фундаментальные и прикладные задачи:

- Исследования физико-химических свойств веществ и процессов при экстремальных условиях
- Национальная безопасность
- Инерциальный термоядерный синтез, кинетика реакций при экстремальных условиях
- Безопасность ядерной энергетики
- Функционирование мощных энергетических установок
- Техногенные катастрофы
- «Космический мусор», астероидная опасность



# Уравнение состояния: определение и требования

*«Уравнение состояния — функциональная зависимость между параметрами, характеризующими состояние вещества, — является его основной количественной характеристикой, дающей возможность применения общего формального аппарата термодинамики и динамики сплошных сред (математической физики) к объектам и процессам чрезвычайно разнообразной природы — от тепловых машин и биологических структур до ультраэкстремальных условий Большого взрыва и релятивистских адронных столкновений» В. Е. Фортов, УФН, 184(3), 231-245 (2014)*

- широкодиапазонность
- высокая точность
- гладкость и непрерывность описания в пределах одной фазы
- масштабируемость
- эффективность использования в расчетах
- сопротивление сжатию: при  $P \rightarrow \infty$ ,  $T = \text{const}$   $1/\rho \rightarrow 0$
- устойчивость процесса теплопроводности  $C_v = (dE/dT)_v > 0$
- существование скорости звука  $(dP/dV)_s < 0$
- устойчивость ударной волны сжатия  $(d^2P/dV^2) > 0$

# Широкодиапазонные УРС металлов

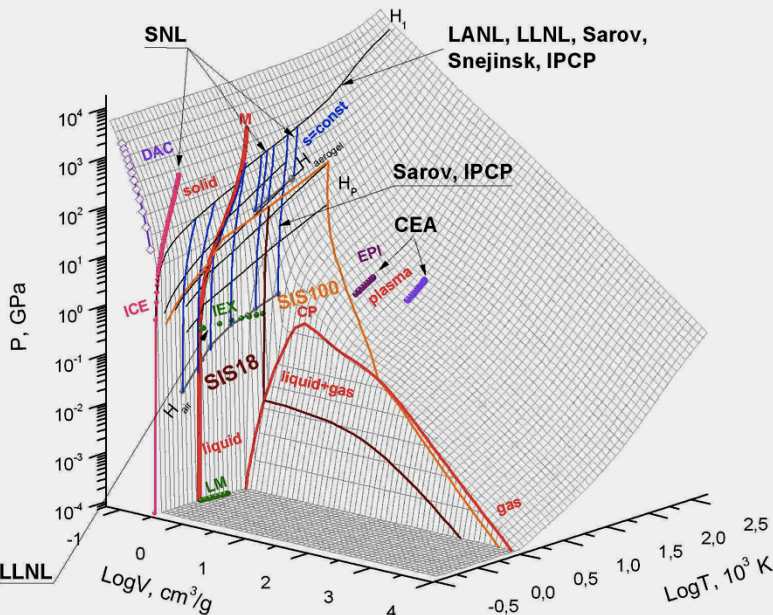
Разработаны широкодиапазонные **уравнения состояния (УРС)** 30 металлов; область применимости  $0 < T < 10^6$  К,  $10^{-5} < \rho / \rho_0 < 10^3$ , учтены эффекты испарения и плавления, ионизации, перехода металл-диэлектрик и пр.

Базисная информация:

- справочные данные при  $P=1$  бар
- расчеты по первопринципным и плазменным моделям
- сжимаемость  $P(V, T=const)$  в алмазных наковальнях
- $P$ - $T$  устройства и подогреваемые алмазные наковальни
- плотность, скорость звука в жидких металлах
- изобарическое расширение металлов при нагреве мощным током
- электровзрыв фольг
- ударные адиабаты кристалла, охлажденного, нагретого, пористого вещества, повторное сжатие в отраженной ударной волне
- сравнительная ударная сжимаемость в подземных ядерных взрывах
- изоэнтропическое и многоступенчатое ударное сжатие
- изоэнтропическое расширение ударносжатого вещества
- оценки критической точки

Выполнен расчет фазовых диаграмм и сопоставление с данными экспериментов и теорий, показано, что построенные **УРС** описывают имеющиеся разнородные данные непротиворечивым образом с погрешностью, не превышающей погрешности исходного эксперимента, и обеспечивают надежность и точность описания высокоэнергетических процессов при проведении численного моделирования.

H							He		
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne		
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd
Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt
Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		



## Теории

твердое тело – зонные методы, МФП  
 жидкость – интегральные уравнения, КМД  
 плазма – химическая модель плазмы  
 большие плотности, высокие температуры - ТФП

## Производные потенциала из экспериментов:

алмазные наковальни  $P(V, T=const)$   
 жидкие металлы  $\rho, Cs(P=1 \text{ бар})$   
 изоэнтропическое сжатие  $P(V, S=const)$   
 электровзрыв проволочек  $E, V, T, H, Cs (P=const)$   
 электровзрыв фольг  $P(E, V=const)$   
 ударное сжатие сплошного, пористого вещества,  
 повторное и многоступенчатое сжатие  $P, V, E$   
 изоэнтропическое расширение ударносжатого  
 вещества  $P(U) (P, V, E)$

# D(iamond) A(nvil) C(ell)

From <http://www.almax-industries.com/>

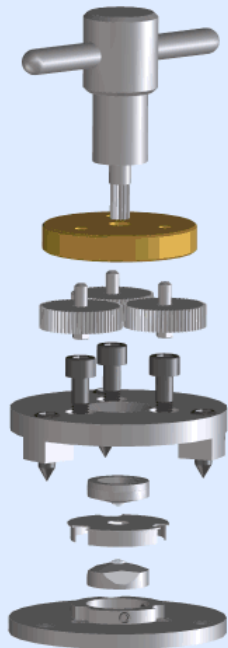
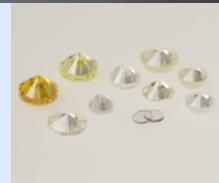
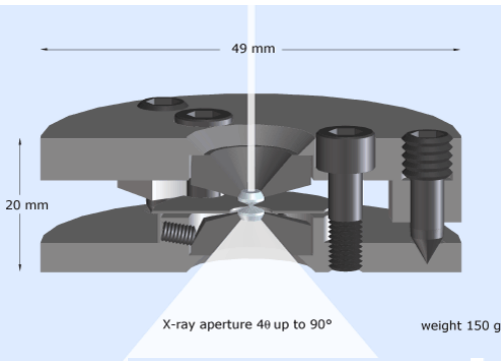
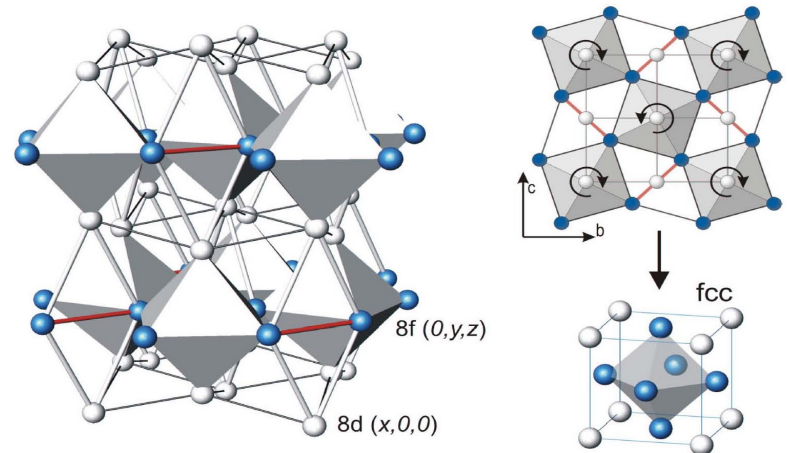
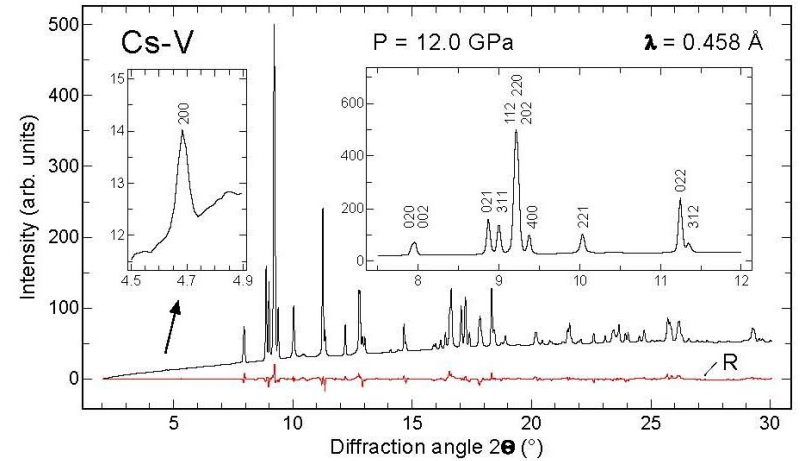


Plate DAC



Plate DAC

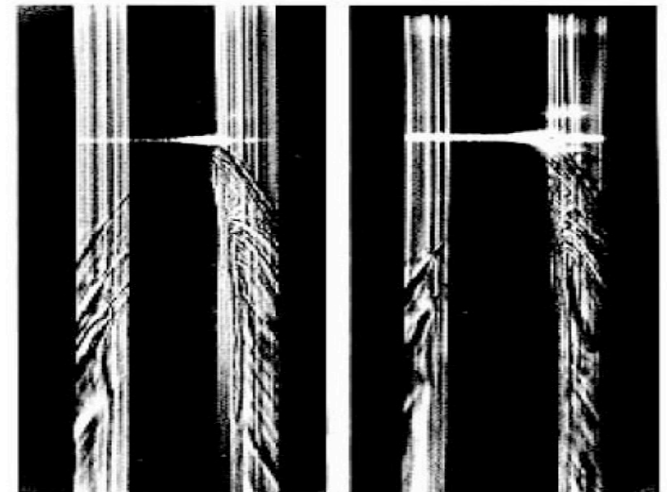
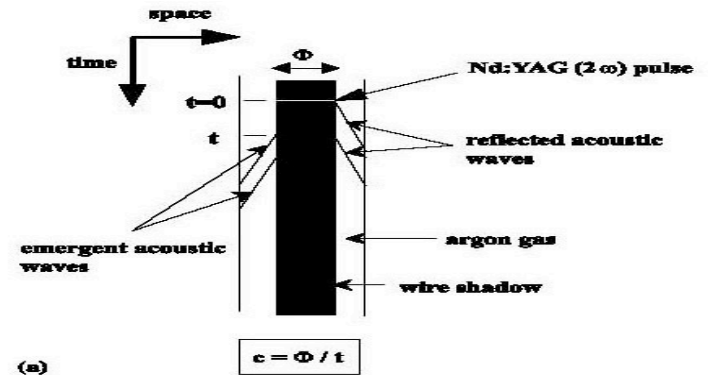
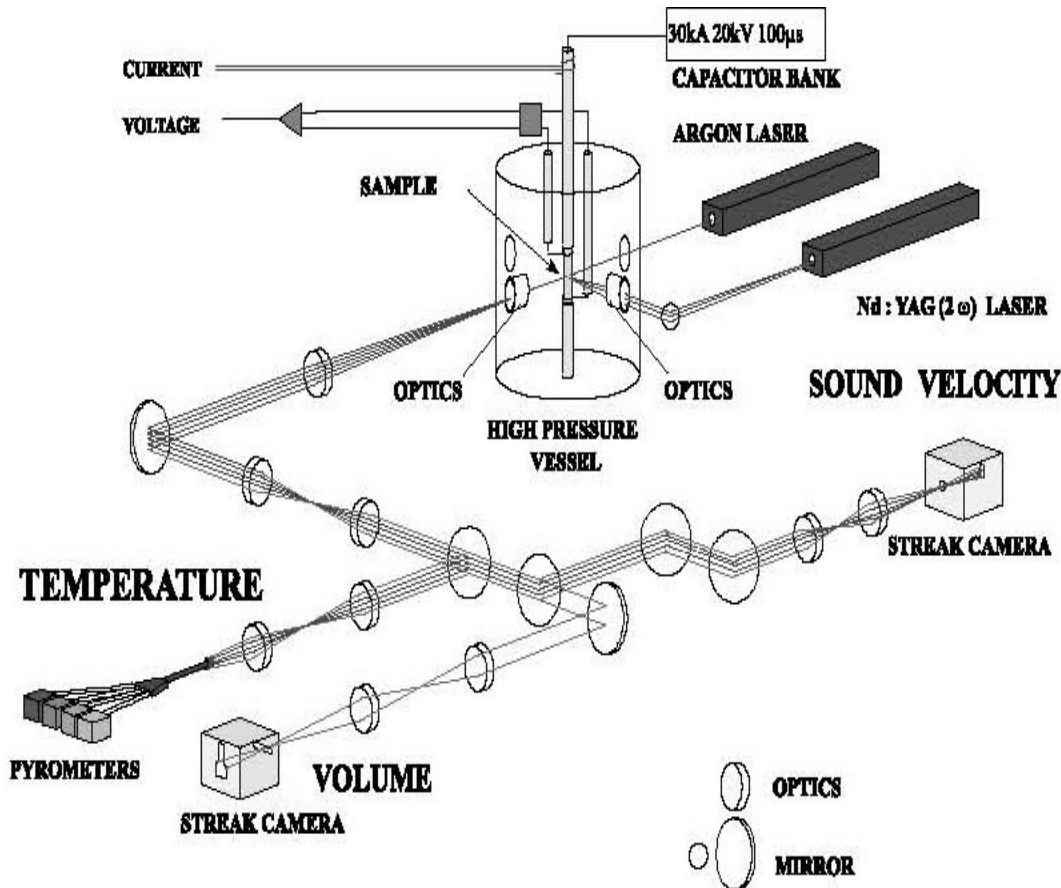
$P < 350$  (660) GPa,  $T = 293$  K  
 $P < 360$  GPa,  $T < 5700$  K (laser-heated)



Angle dispersion and structure of Cs-V according to K.Syassen, Proceed. Enrico Fermi School - 2003

# I(sobaric) EX(pansion)

$P < 4 \text{ kbar}$ ,  $T < 8000 \text{ K}$



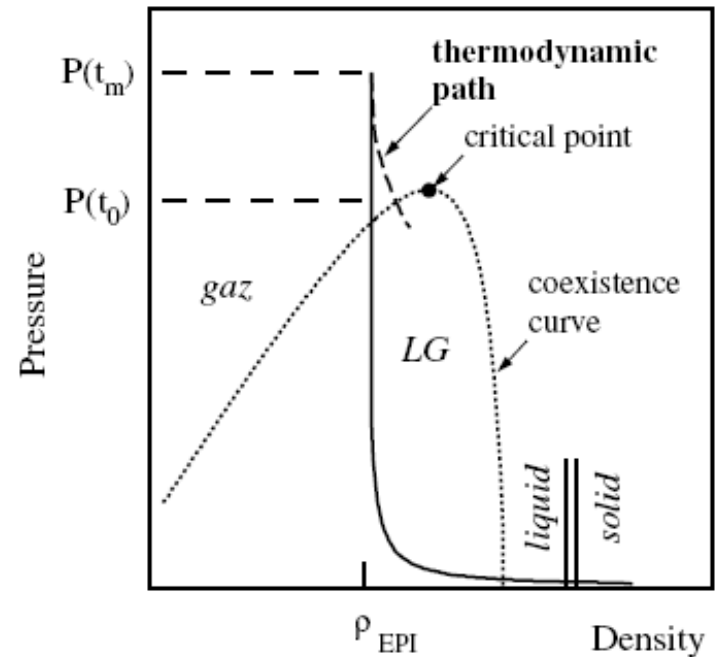
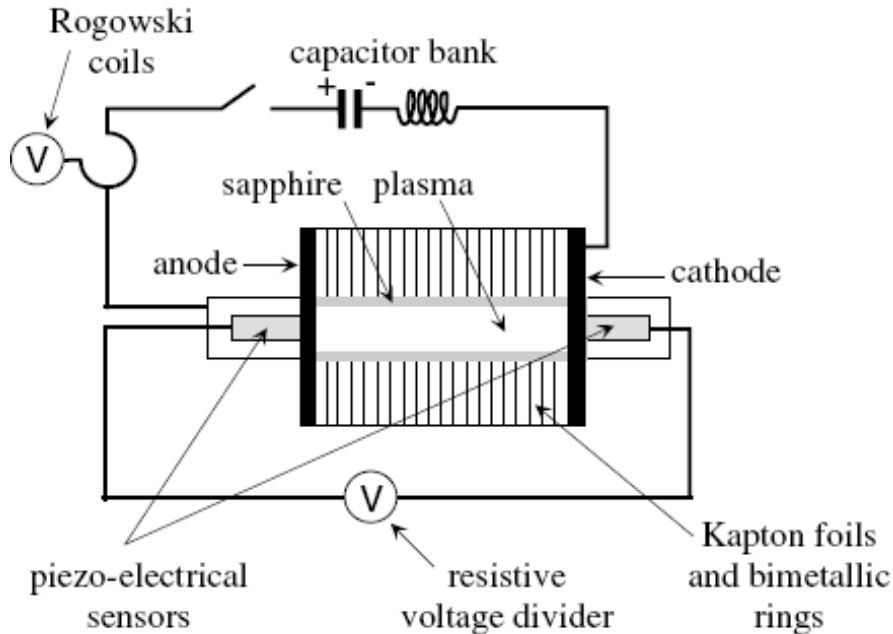
Typical IEX setup according to M.Boivineau,  
J.Nucl.Mat. 297, 97 (2001)

Resistive heating of wire  
 $d = 1 \text{ mm}$ ,  $L = 30 \text{ mm}$   
 discharge 60 kJ capacitor  
 bank in 100 s.

# EPI (isochoric closed-vessel plasma)

$0.3 < P < 3 \text{ GPa}$ ,  $15 < E < 50 \text{ kJ/g}$ ,  $\rho / \rho_0 \sim 0.1$

$T < 40\,000 \text{ K}$  to limit sapphire damage



Schematic thermodynamic path in EPI experiment

EPI setup according to P.Renaudin, C.Blancard, G.Faussurier, P.Noiret. PRL, 88, 215001 (2002)



# Shock & Release Waves

Hugoniot relations:

$$V_0/V = D/(D - U)$$

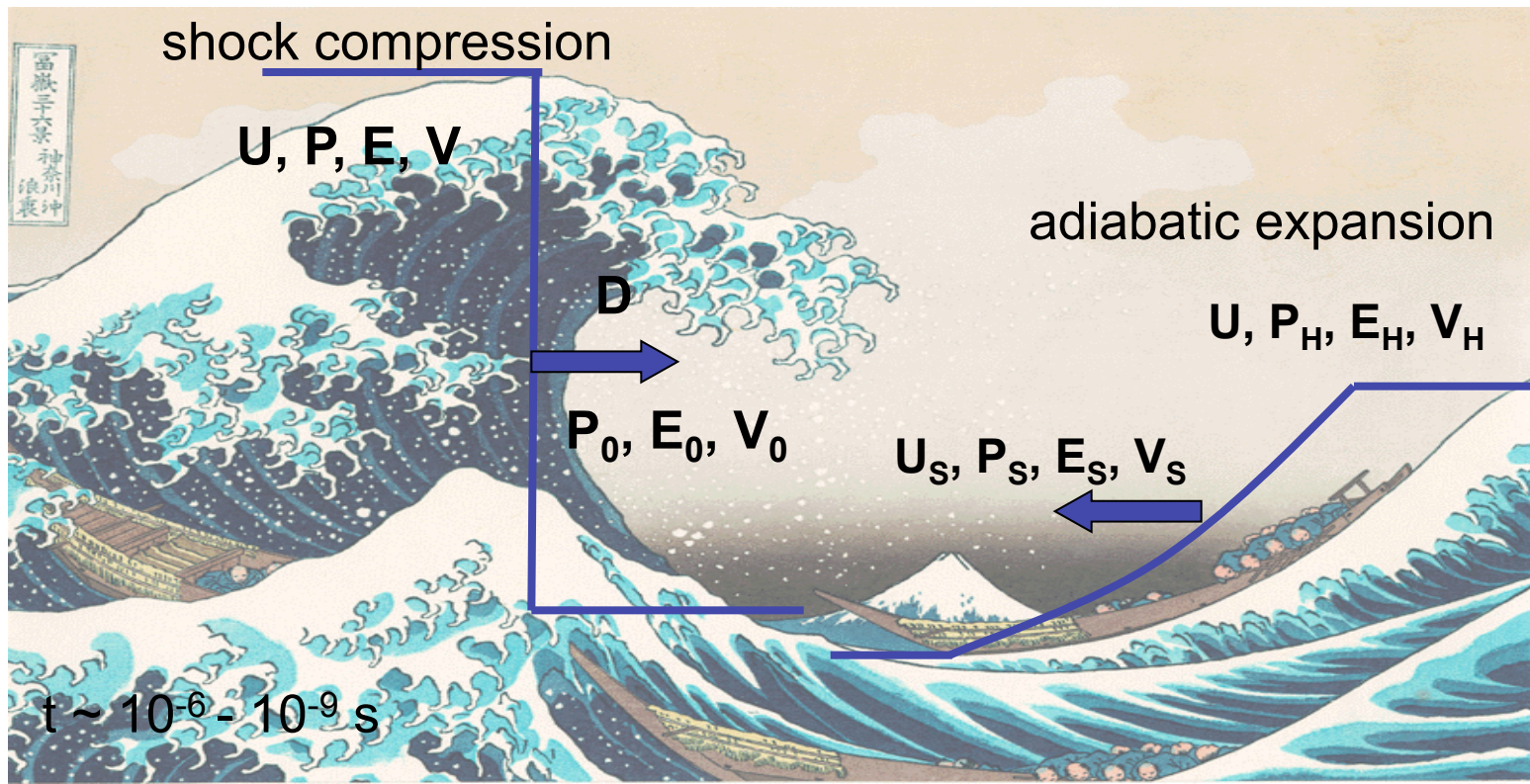
$$P = P_0 + DU/V_0$$

$$E = E_0 + 1/2(V_0 - V)(P_0 + P)$$

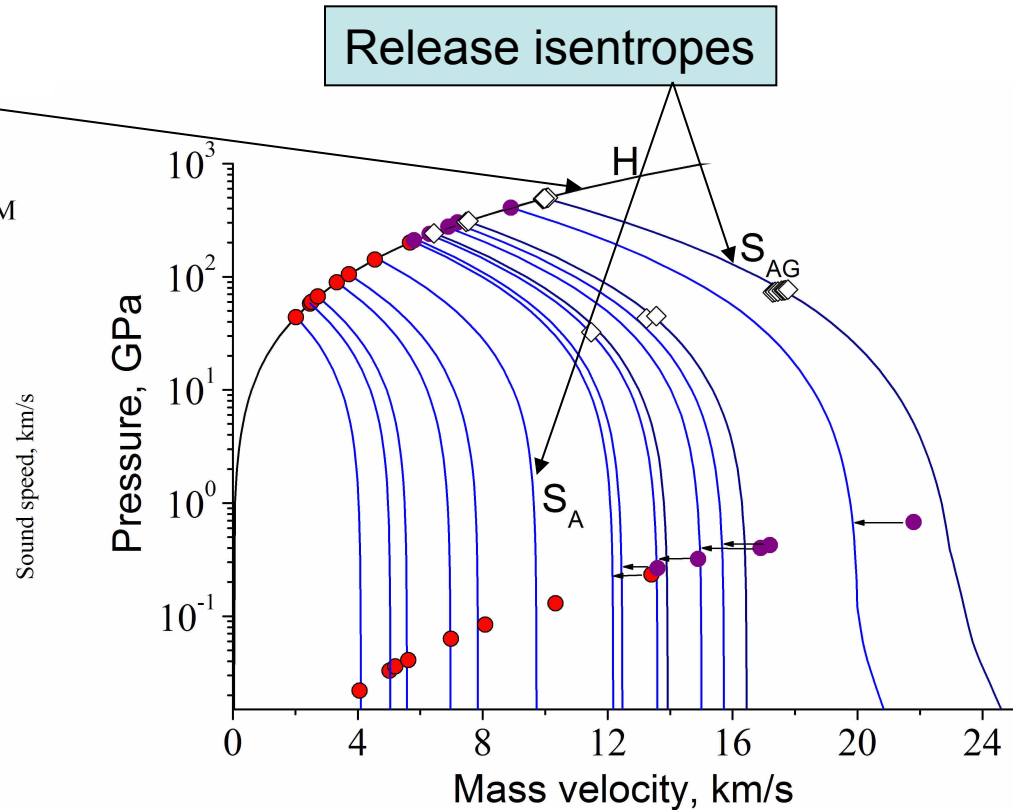
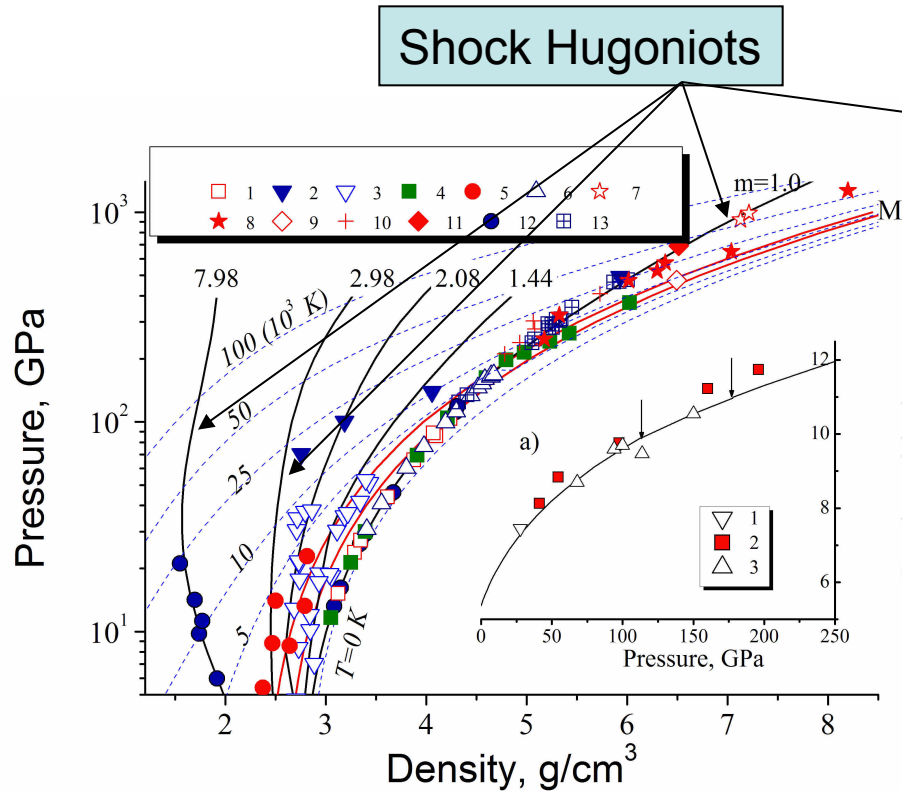
Riemann invariants:

$$V_s = V_H + \int_{P_S}^{P_H} (dU/dP)^2 dP$$

$$E_s = E_H - \int_{P_S}^{P_H} P (dU/dP)^2 dP$$



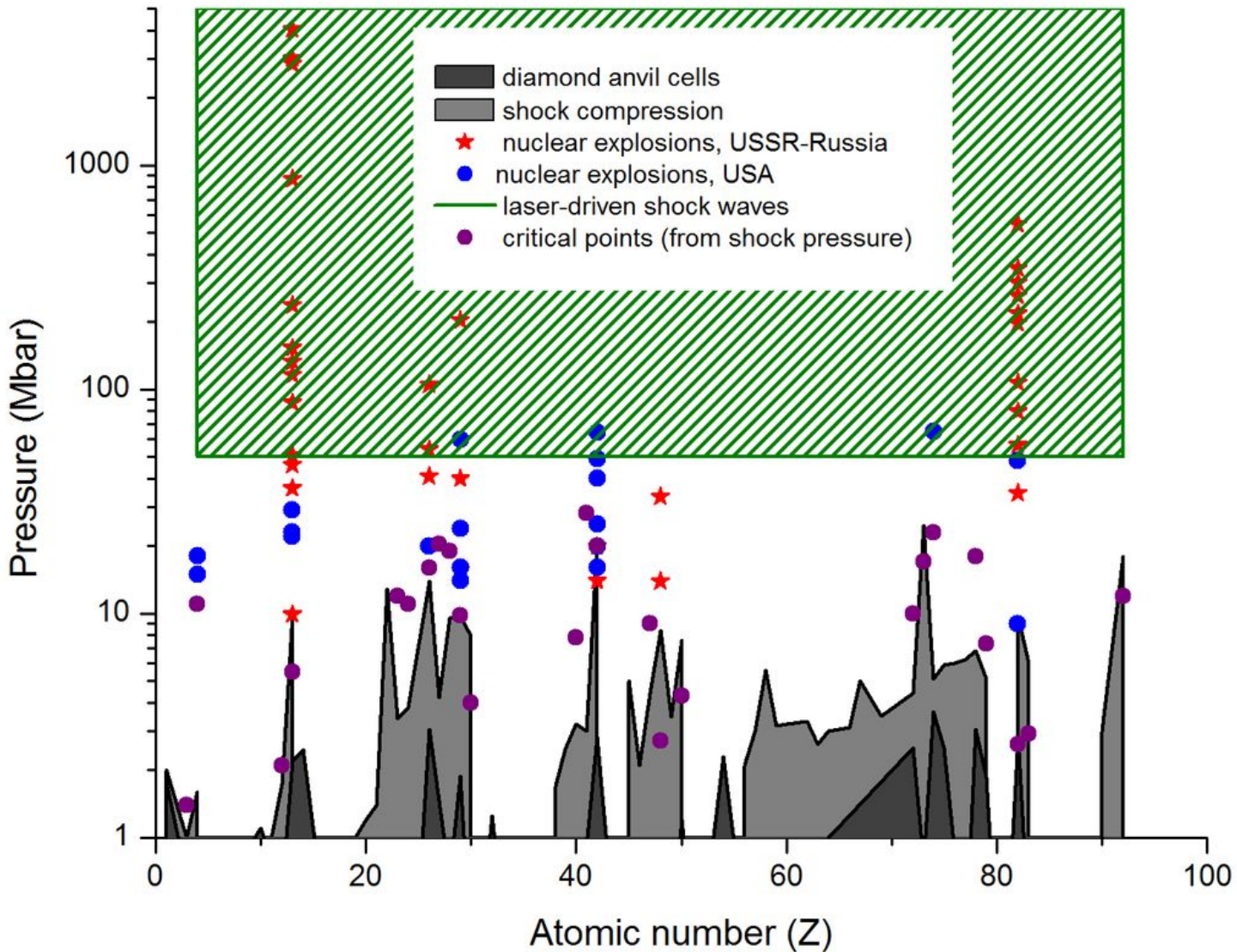
# Shock-Wave Data for Al



Shock compression:  
 $0.3 < \rho/\rho_0 < 6$   
 $P < 400 \text{ TPa (4 Gbar)}$

Release expansion:  
 $10^{-3} < \rho/\rho_0 < 3$   
 $10^{-2} \text{ GPa} < P < 1 \text{ TPa (10 Mbar)}$

# Статические и динамические экстремальные давления



# Информация по УРС

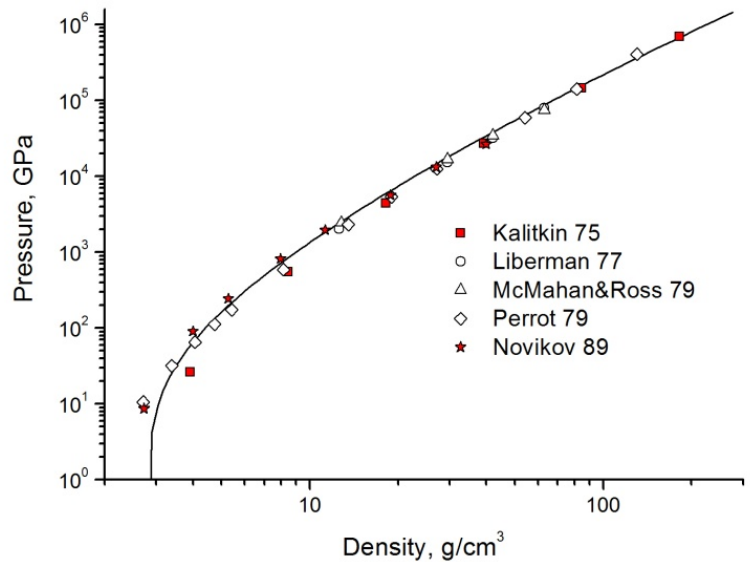
	Свойства	Ограничения
<b>Теория</b> кристалл ( $T=0$ К, конечные $T$ ), жидкость, плазма	Структура, термодинамика, транспорт	Различные подходы Локальная применимость
<b>Эксперимент</b> DAC T-DAC  IEX Взрыв фольг  $H_1 - H_p$ (Hugoniot) $s = \text{const}$	$P(V, T = \text{const})$ , структура $P(V, T = \text{const})$ , структура  $H, E, Cs, T, V$ ( $P = \text{const}$ ) $P, E$ , проводимость  $P, V, E, Cs, T$  $P, U, T$	$P < 3.6$ Мбар или 6 Мбар (нано) $P < 3.6$ Мбар $T < 5700$ К/ <b>прочность</b>  $P < 4$ кбар, $T < 8000$ К, $0.1 < V_0/V < 1$ $P < 100$ кбар, $E < 50$ кДж/г, $0.1 < V_0/V < 0.3/T$ $P$ – любое, $V$ – конечное $P < 4$ Гбар, $0.3 < V_0/V < 6$  $P$ - 4-5 порядков, $V$ – 3-4 порядка

Резюме:

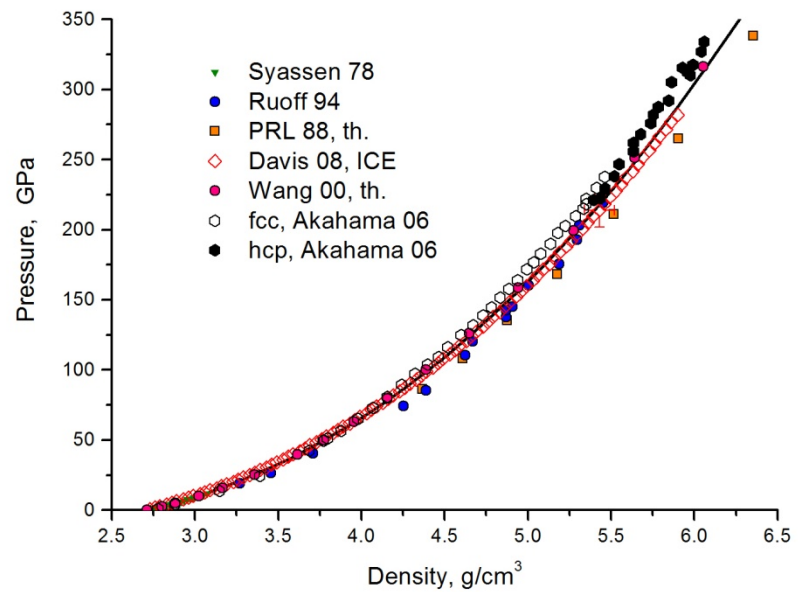
# известны отдельные производные потенциала

# области фазовой диаграммы – локальные для каждого метода, почти не  
 перекрываются

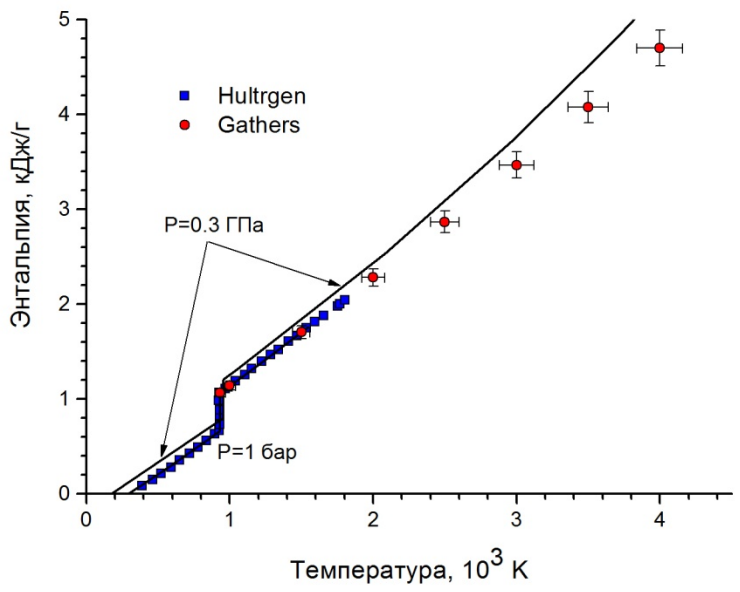
# ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ Al (1)



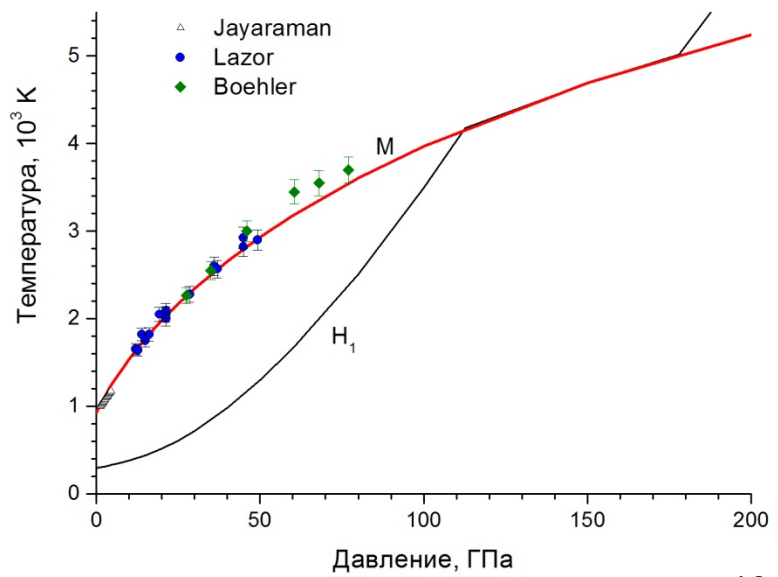
Сжатие Al при T=0 K



Сжатие Al при T=293 K и S=const

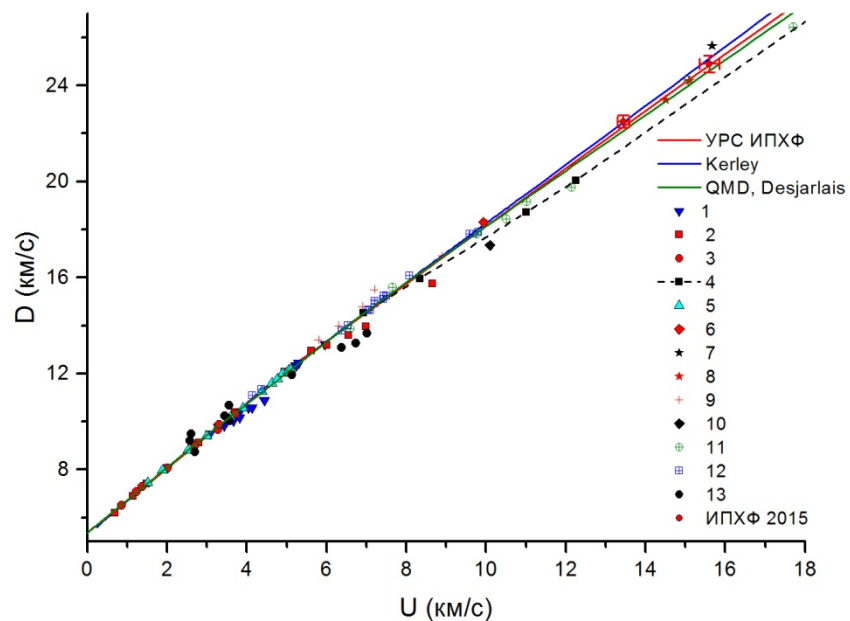


Плавление Al при P=1 бар и 0.3 ГПа

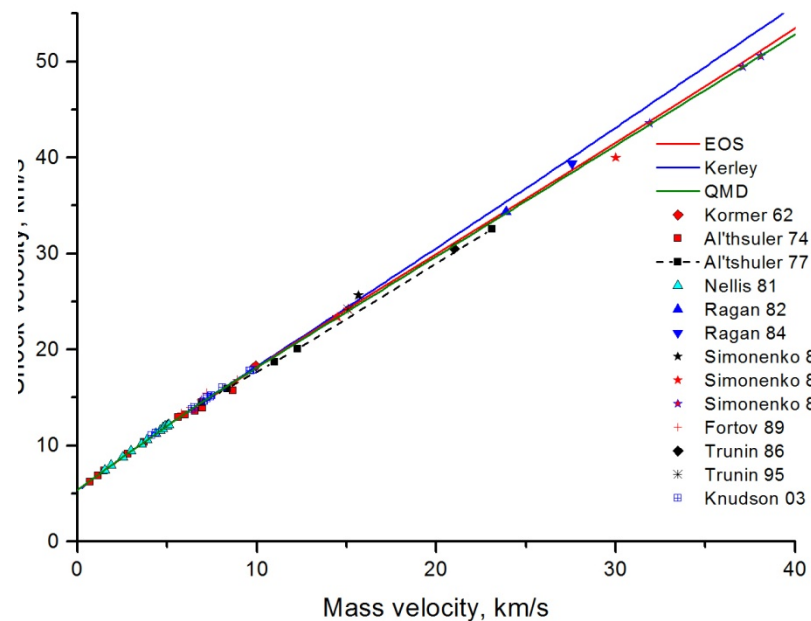


Плавление Al при высоких давлениях

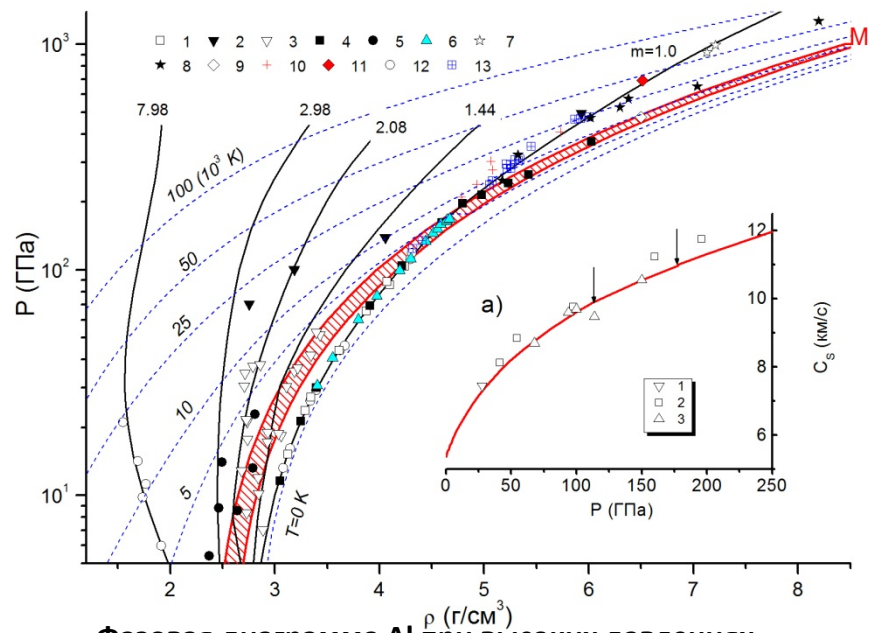
# ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ AI (2)



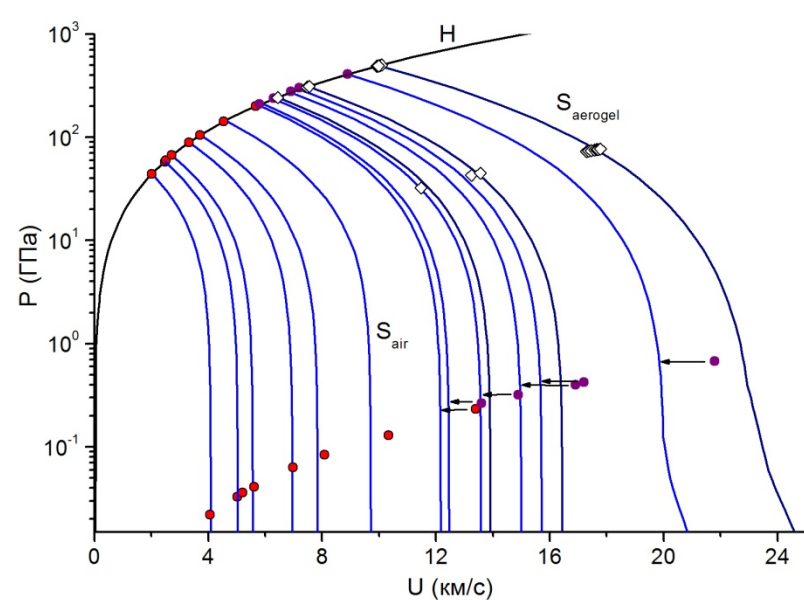
Ударная адиабата Al при терапаскальных давлениях



Ударная адиабата Al при экстремальных давлениях

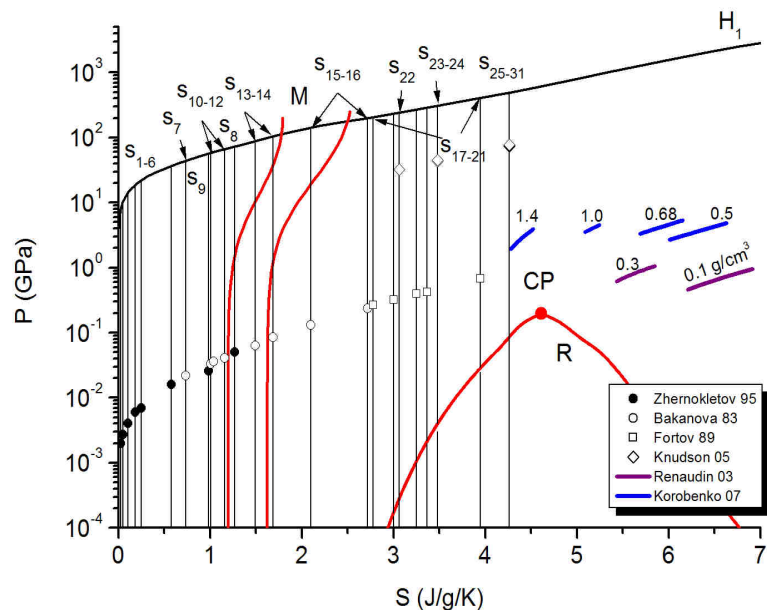


Фазовая диаграмма Al при высоких давлениях

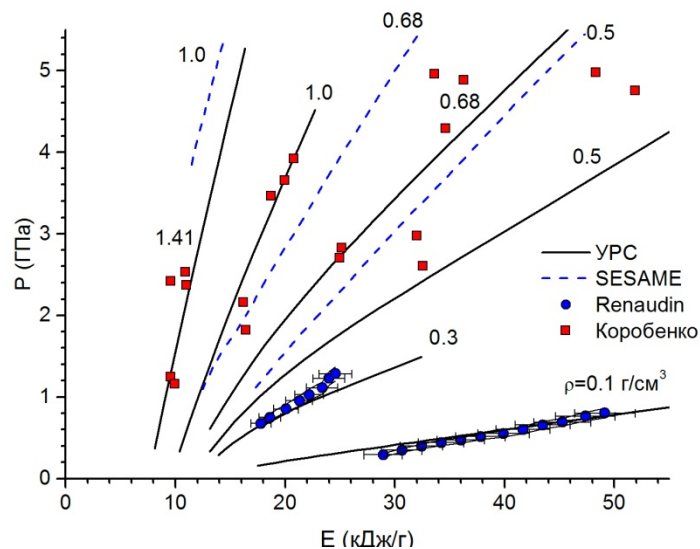


Изоэнтропическое расширение ударно-сжатого Al

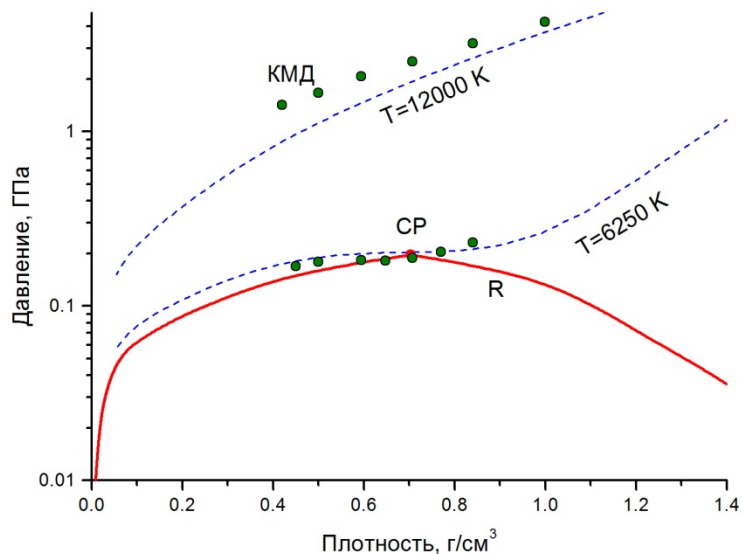
# ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ AI (3)



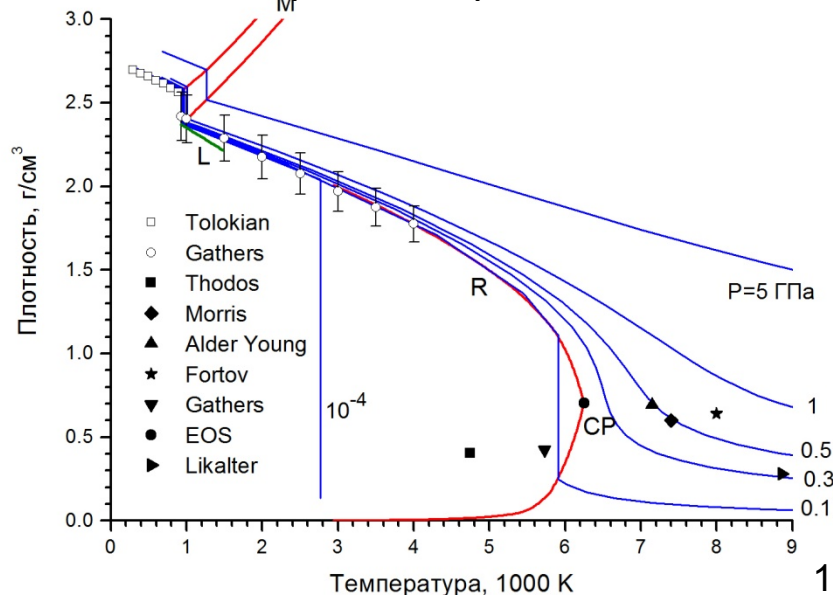
Энтропийная диаграмма Al



Изохорический нагрев Al



УРС Al в области испарения



Фазовая диаграмма Al при пониженных плотностях

# Al: P-V-T

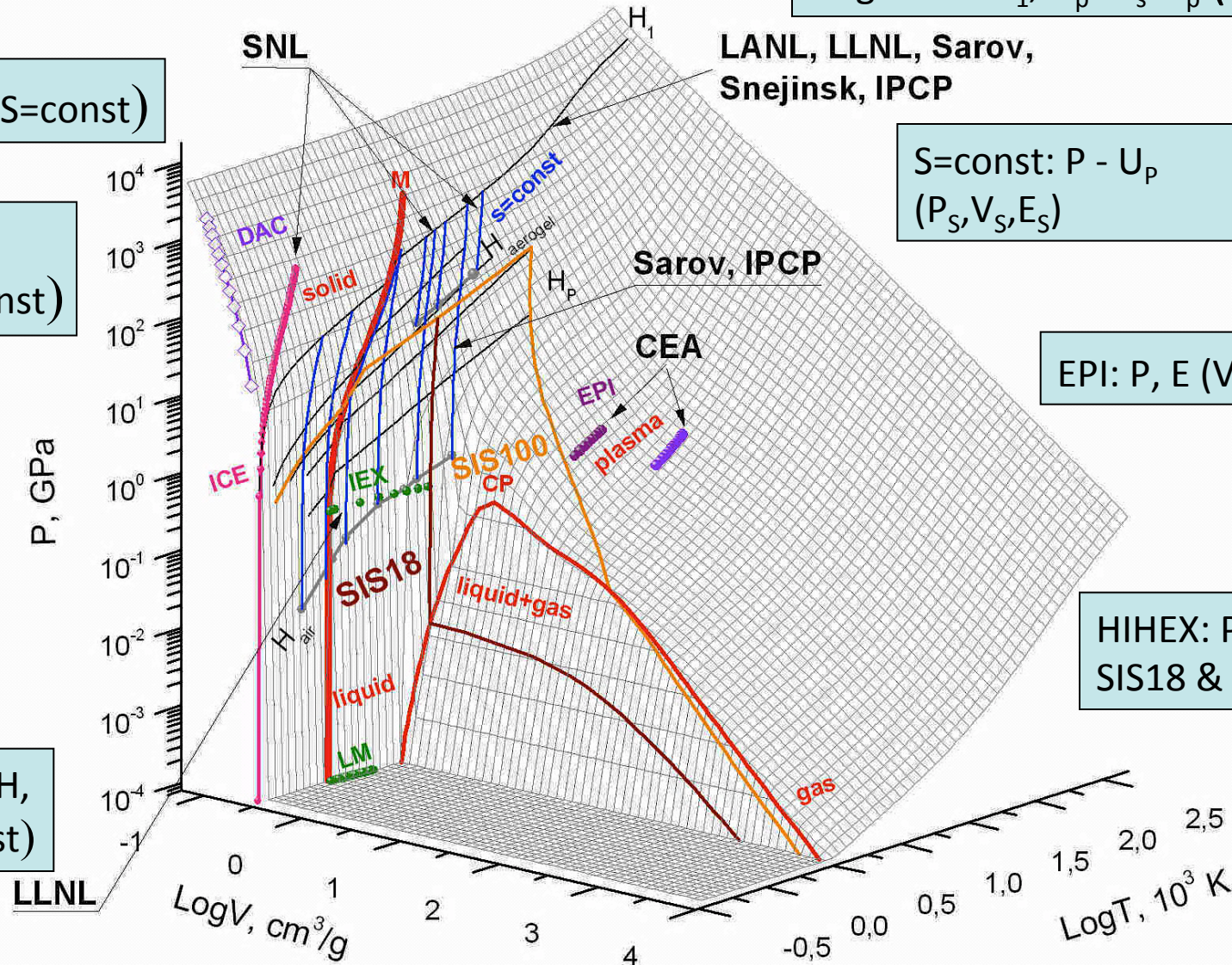
Hugoniots  $H_1, H_p: U_s - U_p (P, V, E)$

LANL, LLNL, Sarov,  
Snezhinsk, IPCP

$S = \text{const}: P - U_p$   
( $P_s, V_s, E_s$ )

EPI:  $P, E (V = \text{const})$

HIHEX:  $P, E, T (t)$   
SIS18 & SYS100



ICE:  $P(V, S = \text{const})$

DAC:  
 $P(V, T = \text{const})$

IEX:  $E, V, T, H,$   
 $C_s (P = \text{const})$



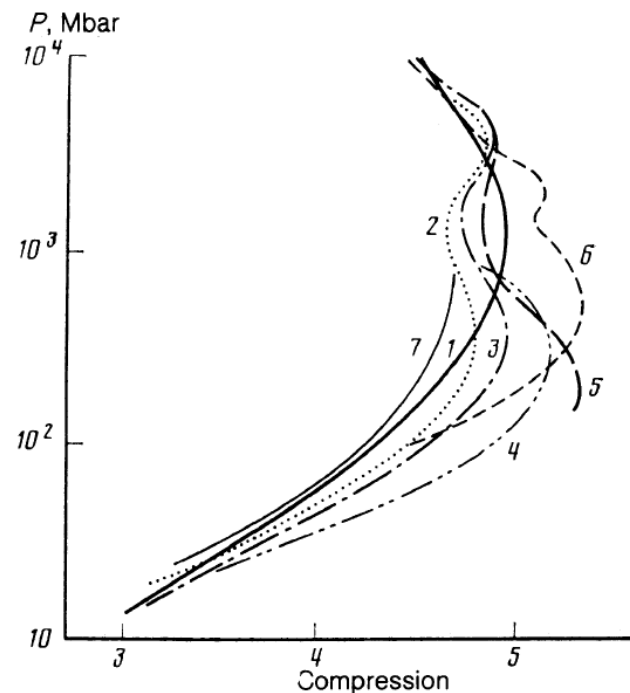
# Сравнительные измерения

Reference	Metal	Standard	Pressure, Mbar
Al'tshuler et al., JETP 27(3), 420-422 (1968)	Fe	Pb	31.3
Trunin et al., JETP 29(4), 630-631 (1969)	Cu	Pb	15.7
	Cd	Pb	13.9
Trunin et al., JETP 35(3), 550-552 (1972)	Cu	Pb	38
	Fe	Pb	51.1
	Cd	Pb	33.3
Al'tshuler et al., JETP 45(1), 167-171 (1977)	Cu	Fe	39.8
	Fe	Pb	53.4
	Cd	Fe	34.4
	Al	SiO <sub>2</sub>	20.4
	Pb	Fe	59.3
Simonenko et al, JETP Lett. 31, 588-591 (1981)	Al	absolute	10.9
Simonenko et al, JETP Lett. 39(2), 85-88 (1984)	Al	Fe	4410
Simonenko et al, JETP Lett. 43(2), 93-96 (1986)	Pb	Fe	541
Trunin et al, JETP 75(4), 777-780 (1992)	Fe	absolute	54.4
Trunin et al, JETP 76(6), 1095-1098 (1993)	Fe	absolute	104.8
Trunin, UFN, 164(11), 1215-1237 (1994)	Cu	Fe, Al	204
	Cd	Cu	33.9
	Fe	Al	191.2
	Pb	Fe	217.6
	Mo	Fe	14.1

**USSR-RUSSIA:**

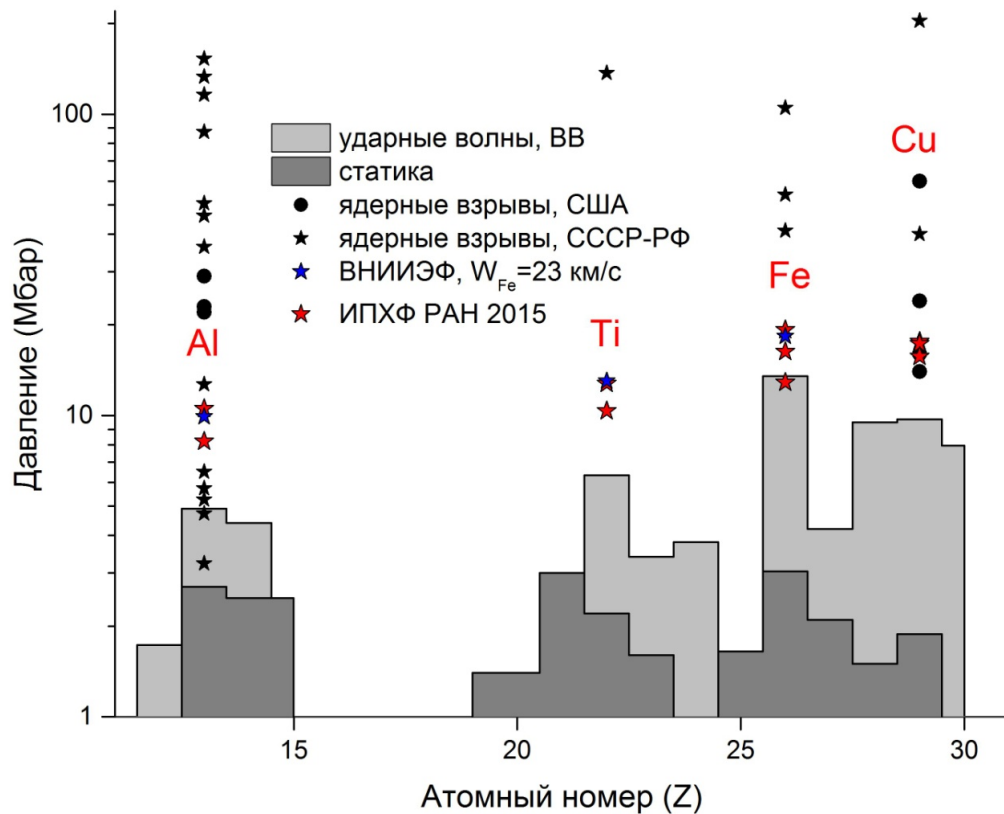
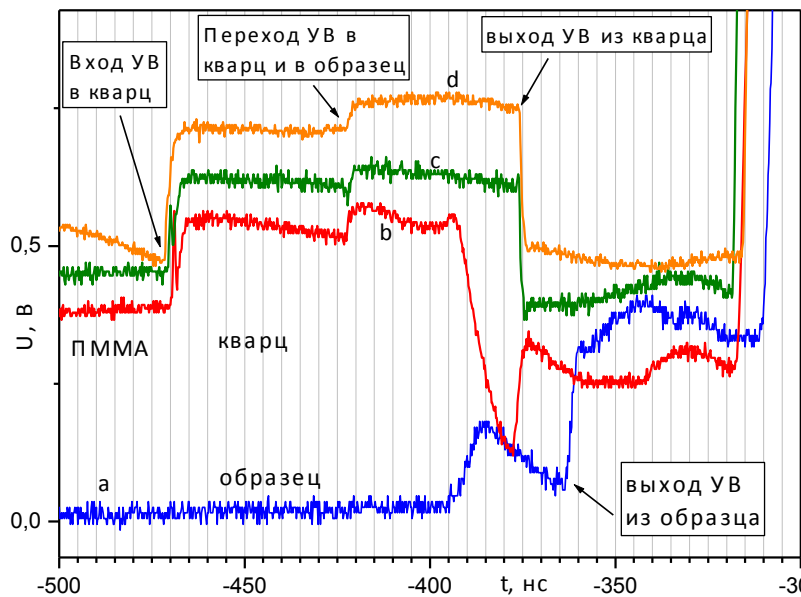
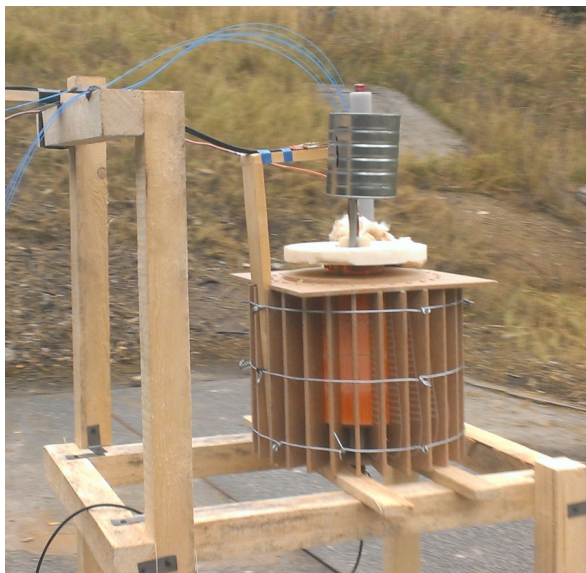
5 standards

4.4 Gbar



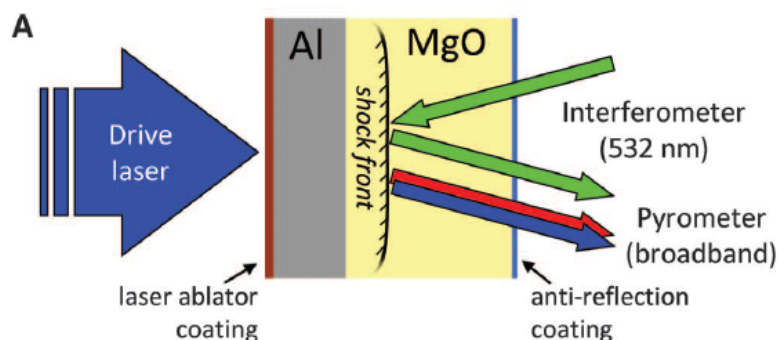
Reference	Metal	Standard	Pressure, Mbar
Ragan et al, JAP, 48, 2860-2870 (1977)	Mo	absolute	19.9
Ragan, PRA, 25, 3360-3375 (1982)	Al	Mo	22.2
	Mo		49.0
Ragan, PRA, 29, 1391-1402 (1984)	Cu	Mo	60.6
	Fe	Mo	57.3
	Al	Mo	29.5
	Mo		64.2
Nellis, et al., JAP, 69, 2981-2986 (1991)	Cu	Mo	23.2
	Pb	Mo	8.9
	Mo		24.3

# Маховый взрывной генератор ИПХФ РАН

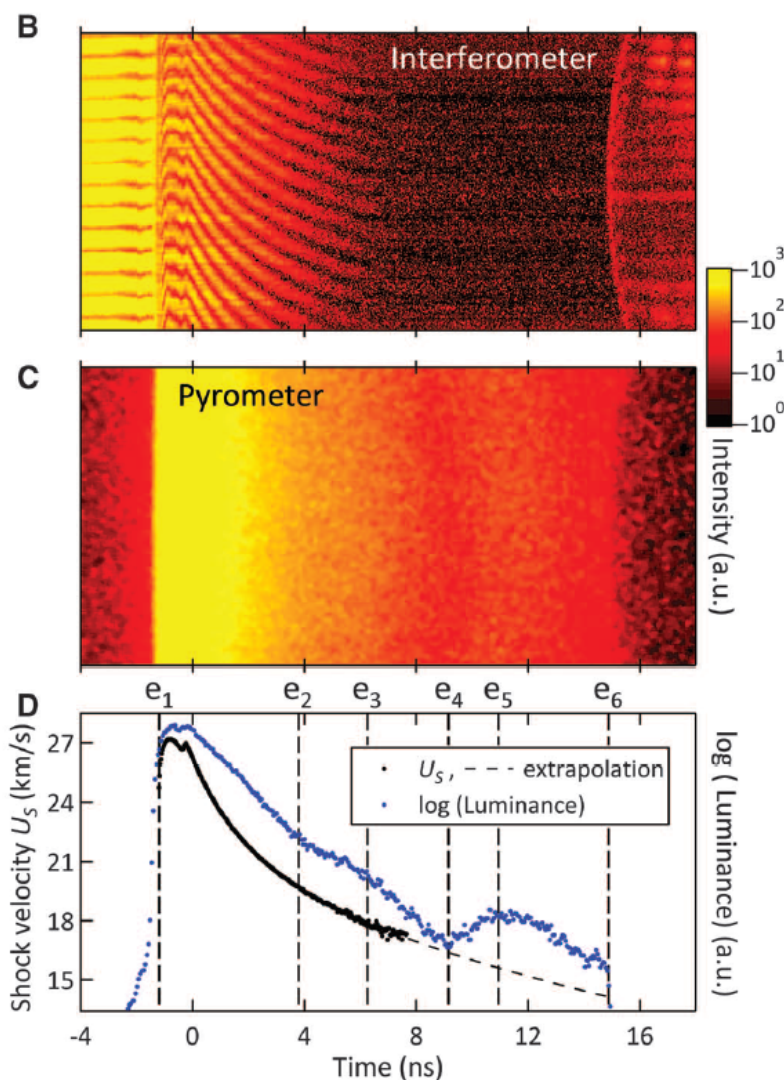


**Новые данные ИПХФ РАН:**  
**Al 0.82-1.05 ТПа, Ti 1.04-1.28 ТПа,**  
**Cu 1.57-1.76 ТПа, Fe 1.29-1.92 ТПа**  
 $dD/D < 2\%$

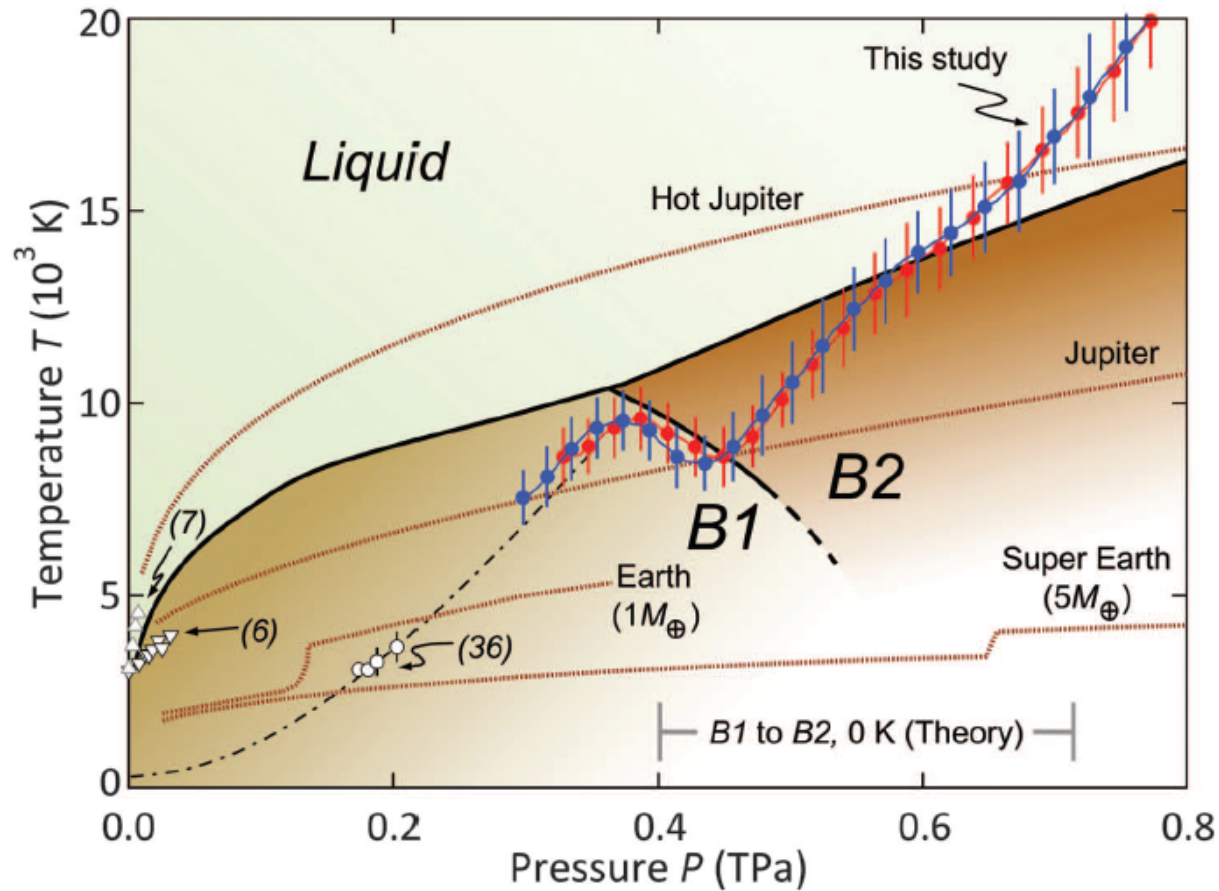
# Фазовые переходы в лазерных ударных волнах



**Fig. 1.** Schematic of laser-shock experiments (A) showing target configuration with drive laser impinging on an Al buffer plate to which the sample (MgO) or a combination of standard ( $\text{SiO}_2$ ) and sample were attached (11). Shock velocity, temperature, and reflectivity were determined using velocity interferometry (B) and streaked optical pyrometry (C) that document intensity (of interference fringes or self-emission, respectively) as a function of distance across the target (vertical axis,  $\sim 500 \mu\text{m}$  full scale) and time (horizontal axis,  $\sim 22 \text{ ns}$  full scale) (11–14). Reflectivity and velocity are determined, respectively, from the observed intensity and fringe shift in (B), with shock velocities extrapolated below  $U_s = 17.3 \text{ km/s}$  where reflection from the shock was not detectable (11). In the shock-velocity (black dots, dashed line where extrapolated) and emission-intensity (blue dots) records (D), events are labeled  $e_1$  to  $e_6$ : Entry of the shock into the MgO sample ( $e_1$ ) and a period of nearly steady shock propagation are followed by steady decay of velocity and emission until  $e_2$ , where the rate of emission decay decreases, then increases ( $e_3$ ), while velocity continues to decay steadily; then emission increases ( $e_4$  to  $e_5$ ) and decays again before the shock exits the MgO ( $e_6$ ).



# Фазовые переходы



Phase Transformations and Metallization of Magnesium Oxide at High Pressure and Temperature. R. Stewart McWilliams, Dylan K. Spaulding, Jon H. Eggert, Peter M. Celliers, Damien G. Hicks, Raymond F. Smith, Gilbert W. Collins, Raymond Jeanloz  
Science, 2012, V.238

# Лазерное безударное сжатие

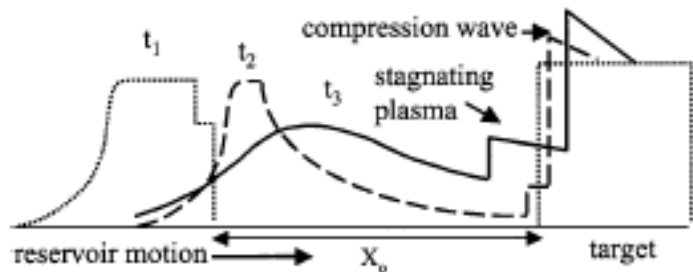


FIG. 1. Schematic of target density at three times:  $t_1$  the shock is about to break out of the reservoir;  $t_2$ , the reservoir has unloaded across the gap and is starting to pile up against the sample initiating the shockless compression wave;  $t_3$ , the reservoir continues to rarefy, the load is increasing, and the wave in the sample is beginning to steepen.

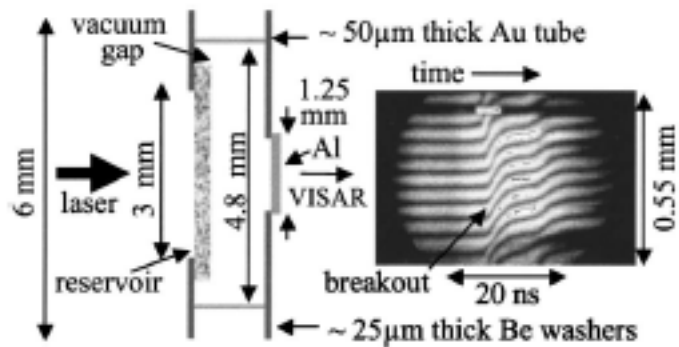


FIG. 2. Schematic of the target, and a typical VISAR record reflected from the rear of a  $29.4 \mu\text{m}$  Al foil (Table I, B). Fringe motion indicates acceleration of the surface ( $1.65 \text{ km/s/fringe}$ ). Targets were axisymmetric about the laser axis.

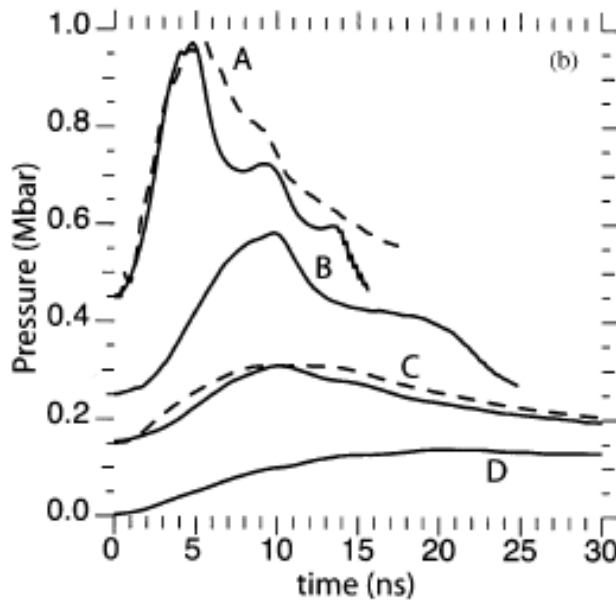
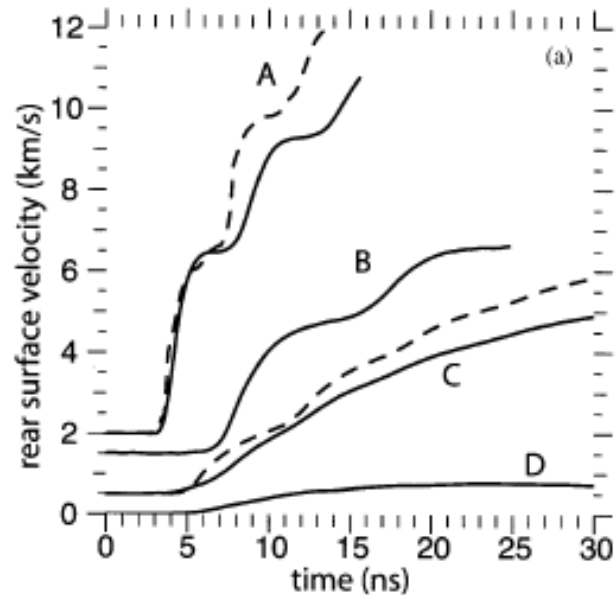


FIG. 3. (a) Rear surface velocity data for the experiments listed in Table I, and the associated backintegrated front surface loads (b). Integrated LASNEX simulations (dashed lines) are shown for cases A and C. Curves A, B, and C are offset vertically by  $+(2, 1.5, 0.5) \text{ km/s}$  and  $+(0.45, 0.25, 0.15) \text{ Mbar}$  for clarity.

# Выводы

**Для разработки УРС актуальны лазерные данные**

- ❖ Эксперименты с лазерными УВ для высоких ТПа-давлений
- ❖ Лазерные УВ при умеренных (Мбар) давлениях – фазовые переходы
- ❖ Лазерное безударное сжатие – высокие давления
- ❖ Изэнтропическое расширение
- ❖ Диагностические средства – интерферометрия, пирометрия (включая ИК)