

УДК 536.71

В.И. Антонов, Р.В. Давыдов, Н.В. Калинин

ШИРОКОДИАПАЗОННЫЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ И МЕДИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ВЕЩЕСТВО

V.I. Antonov, R.V. Davydov, N.V. Kalinin

ALUMINUM AND COPPER WIDE-RANGE EQUATION OF STATE FOR MODELING EXPOSURE TO LASER RADIATION ON MATTER

Разработаны широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния для алюминия и меди. Получено для этих металлов хорошее согласование расчетов по разработанным уравнениям с экспериментальными данными по ударным адиабатам в области от небольших до очень высоких давлений. Предложенные уравнения состояния могут быть использованы для моделирования воздействия лазерного излучения на алюминий и медь.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ; ЛАЗЕРНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ; МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ; АЛЮМИНИЙ; МЕДЬ.

In this article wide-range semi-empirical equations of state for aluminum and copper were developed. Good agreement with experimental data in the range from small to very high pressures was obtained using these equations for modeling shock adiabats for both metals. The proposed equations of state can be used for modeling exposure to laser radiation on aluminum and copper.

EQUATION OF STATE; LASER RADIATION; MATHEMATICAL MODELLING; ALUMINUM; COPPER.

Результаты фундаментальных исследований в области физики высоких плотностей энергии имеют множество практических применений в различных отраслях промышленности и энергетики. Круг задач, которые решают исследователи и разработчики новых технологий, очень широк: от простой обработки металлов лазерным излучением до проблем с термоядерным синтезом. Особенно быстро развиваются направления, связанные с воздействиями мощного лазерного излучения на вещество [1]. Проведение подобных экспериментов — дорогостоящий процесс, требует как специального оборудования, так и привлечения значительного числа обслуживающего персонала, причем вероятность получения в таких экспериментальных исследованиях положительного результата невысока. Это объясняется тем, что сложен экс-

перимент, его проведение зависит от большого числа мало связанных между собой факторов и условий. Поэтому перед тем, как проводить дорогостоящие и трудоемкие экспериментальные исследования, необходимо, опираясь на теорию и моделирование процессов, оценить будущие возможные результаты, на основании чего сделать вывод о целесообразности исследований в конкретном направлении, особенно если теория и моделирование показывают отсутствие возможного положительного результата. Для успешного же моделирования такого рода процессов необходимо знать термодинамические свойства вещества в широком диапазоне температур и давлений. Таким образом, существует потребность в создании широкодиапазонных уравнений состояния веществ, что и является целью данной работы.

Подходы к разработке широкодиапазонных уравнений состояния

При воздействии на металлы интенсивных потоков энергии происходят быстрые переходы вещества из одного агрегатного состояния в другое, начиная с твердого тела и заканчивая плазмой. Расчет термодинамических свойств в такой ситуации представляет довольно сложную задачу [2]. Использовать только теоретические подходы для ее решения недостаточно [3].

Для описания свойств слабонеидеальной плазмы часто используют химическую модель, основанную на уравнениях ионизационного равновесия, но учет эффектов неидеальности в рамках модели представляет собой серьезную проблему, полностью не решенную до настоящего времени [4].

В последнее время активно развиваются такие перспективные подходы, как прямое численное моделирование квантовыми методами Монте-Карло [5, 6] и молекулярной динамики [7], но их возможности пока ограничены. А квантово-статистические модели (модели Томаса — Ферми, Хартри — Фока) часто рассматривают только свойства электронной подсистемы в приближении сферической ячейки и пренебрегают оболочечной структурой электронов атома. И даже самые современные оболочечные модели, вроде модифицированной модели Хартри — Фока — Слэтера, пока далеки от совершенства.

Таким образом, несмотря на значительный прогресс в разработке моделей для расчета термодинамических свойств веществ, при построении уравнений состояния чаще всего используют полуэмпирический подход, когда в выражение для термодинамического потенциала вводят константы, которые определяют путем сопоставления с расчетными и экспериментальными данными [8]. Простейшими примерами полуэмпирических уравнений являются уравнения ван-дер-ваальсовского типа для газов [9]. Для металлов, в частности алюминия и меди, также было разработано немало уравнений состояния, в том числе широкодиапазонных [10], однако они содержат очень большое число коэффициентов и чересчур громоздки для вычислений. В данной статье предлагаются достаточно простые, но весьма точные широкодиапазонные уравнения состояния для обоих металлов.

Полуэмпирическая модель уравнения состояния

Уравнение состояния можно записывать в различных формах — термической, калорической или канонической. Каноническое уравнение представляет собой выражение для одного из термодинамических потенциалов (внутренняя энергия, энтальпия, свободная энергия Гельмгольца или потенциала Гиббса) через независимые переменные, относительно которых записывается его полный дифференциал. Каноническое уравнение независимо от того, в каком из этих четырех видов оно представлено, содержит полную информацию о термических и калорических свойствах термодинамической системы. Для описания термодинамических свойств металлов в статье используется свободная энергия Гельмгольца F , которая представлена суммой трех слагаемых — отвечающих за тепловой вклад электронной F_e и ядерной F_a компонент, а также упругой части взаимодействия F_c :

$$F = F_e + F_a + F_c.$$

Тепловой вклад электронной компоненты в уравнение состояния вычислялся по модели Томаса — Ферми с квантовыми и обменными поправками [11]. Это квантово-статистическая модель, широко используемая для расчетов различных свойств плазмы в экстремальных состояниях [12]. Она основана на решении многоэлектронного уравнения Шредингера для атома в приближении сферической ячейки. Но допущения, принятые в этой модели, в частности использование сферической ячейки и пренебрежение корреляционными эффектами, могут привести к существенным ошибкам в области умеренных плотностей и температур при расчетах только лишь по этой модели.

Второе слагаемое в уравнении состояния рассчитывается следующим образом [13]:

$$F_a = \frac{3T}{2m_a} \ln \left(\frac{\theta^2}{T^2} + \frac{\alpha(V_0/V)^{2/3}}{T} \right),$$

где

$$\theta = \theta_0 (V_0/V)^{2/3} e^{\left(\frac{(\gamma_0 - 2/3)B^2 + D^2}{B} \arctg \frac{B \ln(V_0/V)}{B^2 + D(\ln(V_0/V)) + D} \right)}.$$

Здесь m_a — масса атома, V_0 — табличная величина удельного объема, γ_0 — значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях,

а неизвестные коэффициенты B, D, α, θ_0 определялись из требования оптимального описания данных опытов по измерению теплового расширения и ударной сжимаемости пористых образцов веществ.

Зависимость энергии упругого взаимодействия задается в виде [14]

$$F_c a_0 V_{0c} \ln \left(\frac{V_{0c}}{V} \right) - 3V_{0c} \sum_{i=1}^3 \frac{a_i}{i} \left(\left(\frac{V_{0c}}{V} \right)^{\frac{i}{3}} - 1 \right) + 3V_{0c} \sum_{i=1}^2 \frac{b_i}{i} \left(\left(\frac{V_{0c}}{V} \right)^{\frac{i}{3}} - 1 \right),$$

где коэффициенты b_i имеют вид

$$b_1 = - \left[Z^2 \frac{3}{10} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{\frac{1}{3}} + Z^{\frac{4}{3}} \frac{11}{36} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \times a_B E_H (A m_u V_{0c})^{-\frac{4}{3}};$$

$$b_2 = Z^{\frac{5}{3}} \frac{1}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} a_B^2 E_H (A m_u V_{0c})^{-\frac{5}{3}}.$$

Здесь V_{0c} — удельный объем при $P=0$ и $T=0$ К; E_H — энергия Хартри; a_B — радиус Бора; m_u — атомная единица массы, A — атомная масса, Z — атомный номер элемента.

Для определения коэффициентов a_i ставится задача минимизации в точках $V_n = \frac{V_{0c}}{10n}$, $n = 1, \dots, 100$ среднеквадратичного относительного отклонения давления от результатов расчетов по модели Томаса — Ферми с поправками при выполнении условий для давления, модуля объемного сжатия и его первой и второй производных при $V = V_{0c}$:

$$P_c(V_{0c}) = 0;$$

$$B_c(V_{0c}) = - \frac{V dP_c}{dV} = B_0;$$

$$\dot{B}_c(V_{0c}) = - \frac{dB_c}{dP_c} = \dot{B}_0;$$

$$\ddot{B}_c(V_{0c}) = - \frac{d \left(V \frac{dB_c}{dV} \right)_c}{dB_c} = \ddot{B}_0.$$

Задача условной минимизации решается с помощью введения множителей Лагранжа.

Параметры $B_0, \dot{B}_0, \ddot{B}_0$ подбираются итерациями так, чтобы при нормальных условиях удовлетворялись табличная величина удельного объема V_0 и значения модуля изоэнтропического сжатия и его производной по давлению, определенные по данным статических и динамических измерений.

Полученные результаты

В результате исследований были получены уравнения состояния алюминия и меди. Рассчитанные коэффициенты для обоих уравнений приведены в таблице.

Коэффициенты уравнений состояния

Название коэффициента	Значения коэффициента для двух металлов	
	Алюминий	Медь
V_{0c}	0,36	0,11
a_0	6923,21	56,71
a_1	-4772,76	-37952,99
a_2	1265,23	9813,52
a_3	51,24	0,05
b_1	-5061,08	-39123,33
b_2	1597,09	10603,31
θ_0	0,20	0,27
D	0,23	0,52
B	0,32	1,80
γ_0	1,95	1,90
α	0,01	0,01
V_0	0,37	0,11

Были рассчитаны ударные адиабаты для обоих металлов; они сравнивались с экспериментальными данными [15–21] (рис. 1 и 2). Значками на рисунках обозначены различные экспериментальные данные, сплошной линией — расчеты по разработанному уравнению состояния.

Графики демонстрируют, что полученные результаты для обоих металлов очень хорошо совпадают с экспериментальными данными при давлениях до 10^3 ГПа. При более высоких давлениях отмечается небольшое отклонение расчетов от экспериментальных данных, обусловленное с тем, что используемая модель Томаса — Ферми для описания электронной компоненты уравнения состояния не содержит поправок, связанных с оболочечной структурой

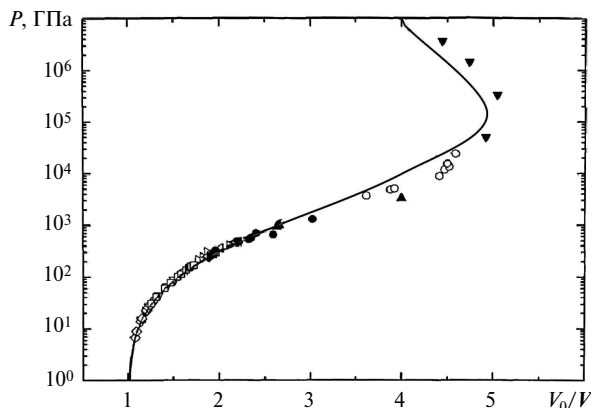


Рис. 1. Ударная адиабата алюминия в координатах «давление — степень сжатия»

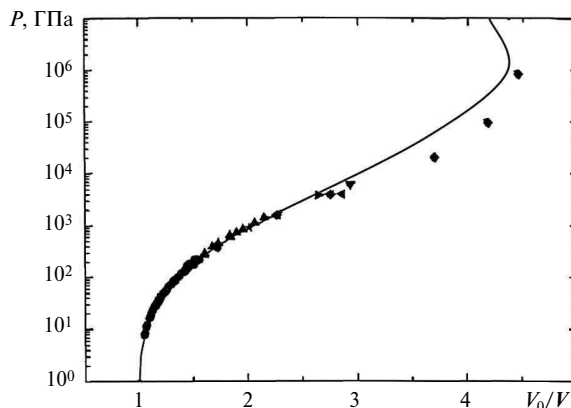


Рис. 2. Ударная адиабата меди в координатах «давление — степень сжатия»

электронов атома. Однако согласованность расчетов с экспериментальными данными остается достаточно хорошей как для алюминия, так и для меди вплоть до давлений порядка 10^6 ГПа. Отсюда можно сделать вывод, что разработанные

уравнения состояния могут быть успешно использованы для моделирования различных задач физики высоких плотностей энергии, в частности воздействия лазерного излучения на алюминий и медь.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макаров Г.Н. Применение лазеров в нанотехнологии: получение наночастиц и наноструктур методами лазерной абляции и лазерной нанолитографии // Успехи физических наук. 2013. №7. С. 673–718.
2. Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы М.: Физматлит, 2010. 528 с.
3. Kremp D., Schlanges M., Kraeft W.D. Quantum Statistics of Nonideal Plasmas. *Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics*, 2005. Vol. 25., 525 p.
4. Хомкин А.Л., Муленко И.А., Шумихин А.С. Базовые химические модели неидеальной атомарной плазмы // Теплофизика высоких температур. 2004. № 6. С. 835–842.
5. Militzer B., Ceperley D.M. Path Integral Monte Carlo Calculation of the Deuterium Hugoniot. *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 85. № 9. P. 49–53.
6. Driver K.P., Cohen R.E., Wu Z., Militzer B., Rios P.L., Towler M.D., Needs R.J., Wilkins J.W. Quantum Monte Carlo computations of phase stability, equations of state, and elasticity of high-pressure silica. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2010. Vol. 107, № 21. P. 9519–9524.
7. Cong W., Yao L., Ming-Feng T., Xian-Tu H., and Ping Z. Equations of state and transport properties of warm dense beryllium: A quantum molecular dynamics study. *Physical Review E*. 2013. 87, 043105.
8. Бушман, А.В. Фортов В.Е. Модели уравнения состояния вещества // Успехи физических наук. 1983. №2. С. 177–232.
9. Новиков И.И. Уравнения состояния газов и жидкостей. К столетию уравнения Ван-дер-Ваальса. М.: Наука, 1975. 264 с.
10. Гударенко Л.Ф., Куделькин В.Г. Метод построения широкодиапазонных термодинамически согласованных уравнений состояния на основе локальных уравнений с использованием модели смеси // «ВАНТ» Серия: Математическое моделирование физических процессов. 2009. 1. С. 44–54.
11. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния М.: Физматлит, 2000. 400 с.
12. Фортов В.Е. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества // Успехи физических наук. 2007. №4. С. 347–368.
13. Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Ашитков С.И. [и др.]. Определение транспортных и оптических свойств неидеальной плазмы твердотельной плотности при фемтосекундном лазерном воздействии // Письма в ЖЭТФ. 2007. Vol. 85. С. 328–333.
14. Хищенко К.В. Уравнение состояния магния в области высоких давлений // Письма в журнал технической физики. 2004. Vol. 19. С. 65–71.
15. Владимиров А.С., Волошин Н.П., Ногин В.Н. [и др.]. Ударная сжимаемость алюминия при $P > 1$ Гбар // Письма в ЖЭТФ. 1984. Vol. 39. С. 69–72.
16. Глушак Б.Л. Жарков А.П., Жерноклетов М.В. [и др.]. Экспериментальное изучение термодинами-

ки плотной плазмы металлов при высоких концентрациях энергии // ЖЭТФ. 1989. Vol. 96. С. 1301–1318.

17. **Marsh S.P.** LASL Shock Hugoniot Data. *Berkeley: University of California Press*. 1980. 658 p.

18. **Mitchell A.C., Nellis W.J.** Shock compression of aluminum, copper and tantalum. *J. Appl. Phys.*, 1981. Vol. 52, № 5. P. 3363–3374.

19. **Симоненко В.А., Волошин Н.П., Владимиров А.С. [и др.]**. Абсолютные измерения ударной сжима-

емости алюминия при давлениях $P > 1$ ТПа // ЖЭТФ. 1985. Vol. 88. С. 1452–1459.

20. **Трунин Р.Ф., Подурец М.А., Симаков Г.В. [и др.]**. Новые данные по сжимаемости алюминия плексигласа и кварца, полученные в условиях сильной ударной волны подземного ядерного взрыва // ЖЭТФ. 1995. Vol. 108. С. 851–861.

21. **Van Thiel M.** Compendium of shock wave data. *Livermore: Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-50108*. 1977. 670 p.

REFERENCES

1. **Makarov G.N.** Primeneniye lazerov v nanotekhnologii: polucheniye nanochastits i nanostruktur metodami lazernoy ablyatsii i lazernoy nanolitografii. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 2013. № 7. S. 673–718. (rus.)

2. **Fortov V.Ye., Khrapak A.G., Yakubov I.T.** Fizika neidealnoy plazmy. M.: Fizmatlit, 2010. 528 s. (rus.)

3. **Kremp D., Schlanges M., Kraeft W.D.** Quantum Statistics of Nonideal Plasmas. *Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics*. 2005. Vol. 25. 525 p.

4. **Khomkin A.L., Mulyukov I.A., Shumikhin A.S.** Bazovyye khimicheskiye modeli neidealnoy atomarnoy plazmy. *Teplofizika vysokikh temperatur*. 2004. № 6. S. 835–842. (rus.)

5. **Militzer B., Ceperley D.M.** Path Integral Monte Carlo Calculation of the Deuterium Hugoniot. *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 85. № 9. P. 49–53.

6. **Driver K.P., Cohen R.E., Wu Z., Militzer B., Rios P.L., Towler M.D., Needs R.J., Wilkins J.W.** Quantum Monte Carlo computations of phase stability, equations of state, and elasticity of high-pressure silica. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2010. Vol. 107, № 21. P. 9519–9524.

7. **Cong W., Yao L., Ming-Feng T., Xian-Tu H., and Ping Z.** Equations of state and transport properties of warm dense beryllium: A quantum molecular dynamics study. *Physical Review E*. 2013. Vol. 87, 043105. (rus.)

8. **Bushman A.V., Fortov V.E.** Modeli uravneniya sostoyaniya veshchestva. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 1983. №2. С. 177–232. (rus.)

9. **Novikov I.I.** Uravneniya sostoyaniya gazov i zhidkostey. K stoletiyu uravneniya Van-der-Vaalsa. M.: Nauka, 1975. 264 s. (rus.)

10. **Gudarenko L.F., Kudelkin V.G.** Metod postroyeniya shirokodiapazonnykh termodinamicheskikh soglasovannykh uravneniy sostoyaniya na osnove lokalnykh uravneniy s ispolzovaniyem modeli smesi. «VANT» Seriya: Matematicheskoye modelirovaniye fizicheskikh protsessov. 2009. №1. S. 44–54. (rus.)

11. **Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B.** Kvan-

tovo-statisticheskiye modeli vysokotemperaturnoy plazmy i metody rascheta rosselandovykh probegov i uravneniy sostoyaniya. M.: Fizmatlit, 2000. 400 s. (rus.)

12. **Fortov V.Ye.** Moshchnyye udarnyye volny i ekstremalnyye sostoyaniya veshchestva. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 2007. №4. S. 347–368. (rus.)

13. **Agranat M.B., Andreyev H.E., Ashitkov S.I. [и др.]**. Opredeleniye transportnykh i opticheskikh svoystv neidealnoy plazmy tverdotelnoy plotnosti pri femtosekundnom lazernom vozdeystvii. *Pisma v ZhETF*. 2007. №85. S. 328–333. (rus.)

14. **Khishchenko K.V.** Uravneniya sostoyaniya magniya v oblasti vysokikh davleniy. *Pisma v zhurnal tekhnicheskoy fiziki*. 2004. Vol. 19. S. 65–71. (rus.)

15. **Vladimirov A.S., Voloshin N.P., Nogin V.N. [и др.]**. Udarnaya szhimayemost alyuminiya pri $R > 1$ Gbar. *Pisma v ZhETF*. 1984. Vol. 39. S. 69–72. (rus.)

16. **Glushak B.L., Zharkov A.P., Zhernokletov M.V. [и др.]**. Eksperimentalnoye izucheniye termodinamiki plotnoy plazmy metallov pri vysokikh kontsentratsiyakh energii. *ZhETF*. 1989. Vol. 96. S. 1301–1318. (rus.)

17. **Marsh S.P.** LASL Shock Hugoniot Data. *Berkeley: University of California Press*. 1980. 658 p. (rus.)

18. **Mitchell A.C., Nellis W.J.** Shock compression of aluminum, copper and tantalum. *J. Appl. Phys.* 1981. Vol. 52, № 5. P. 3363–3374. (rus.)

19. **Simonenko V.A., Voloshin N.P., Vladimirov A.S. [и др.]**. Absolyutnyye izmereniya udarnoy szhimayemosti alyuminiya pri davleniyakh $R > 1$ ТПа. *ZhETF*. 1985. Vol.88. S. 1452–1459. (rus.)

21. **Trunin R.F., Podurets M.A., Simakov G.V. [и др.]**. Novyye dannyye po szhimayemosti alyuminiya pleksiglasa i kvartsa, poluchennyye v usloviyakh silnoy udarnoy volny podzemnogo yadernogo vzryva. *ZhETF*. 1995. Vol. 108. S. 851–861. (rus.)

21. **Van Thiel M.** Compendium of shock wave data. *Livermore: Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-50108*. 1977. 670 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНТОНОВ Валерий Иванович — доктор технических наук заведующий кафедрой высшей математики профессор Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29, Россия; e-mail: antonovvi@mail.ru

ДАВЫДОВ Роман Вадимович — магистрант кафедры прикладной математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29, Россия; e-mail: davydovroman@outlook.com

КАЛИНИН Николай Валентинович — доктор физико-математических наук профессор кафедры высшей математики профессор; Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29, Россия; e-mail: nvkalinin@rambler.ru

AUTHORS

ANTONOV Valeriy I. — St. Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnikeskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia; e-mail: antonovvi@mail.ru

DAVYDOV Roman V. — St. Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnikeskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia; e-mail: davydovroman@outlook.com

KALININ Nikolay V. — St. Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnikeskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia; e-mail: nvkalinin@rambler.ru