Уравнения состояния материалов для решения задач физики высоких плотностей энергии

К. В. Хищенко^{1,2,3,*}

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия ²Московский физико-технический институт, Долгопрудный ³Южно-Уральский государственный университет, Челябинск

*konst@ihed.ras.ru

XVII Международная конференция «Забабахинские научные чтения», 19–23 мая 2025 г., Снежинск, Россия

Equations of state of materials for solving problems of high energy density physics

K. V. Khishchenko^{1,2,3,*}

¹Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, Russia ²Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia ³South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

*konst@ihed.ras.ru

XVII International Conference "Zababakhin Scientific Talks", 19–23 May 2025, Snezhinsk, Russia

Зачем это нужно

We use shock to compress matter and measure equation of state (EOS)

Conservation laws:

Mass $\rho_0 D = \rho (D - U)$

Momentum $\rho_{o}DU = P - P_{o}$

Energy $\rho_{o}D(E - E_{o} + U^{2}/2) = PU$



3 equations, 5 unknown parameters ρ , *D*, *U*, *P*, *E* Measurement of 2 parameters to get an EOS point. This point lies on the principal Hugoniot curve (i.e. the ensemble of all states that can be reached with a single shock) Comparative microstructural studying of samples recovered after shock wave loading of C₆₀ and C₇₀ fullerites





Explosive chamber 13Ya3 JIHT RAS



Лазерная установка «Камертон-Т» (ИОФ РАН)





Длина волны излучения (вторая гармоника) – 0.527 мкм, максимальная энергия в импульсе – до 5 Дж, длительность импульса излучения – 70 пс.

Abrosimov S.A., Bazhulin A.P., Voronov V.V., Geras'kin A.A., Krasyuk I.K., Pashinin P.P., Semenov A.Yu., Stuchebryukhov I.A., Khishchenko K.V., Fortov V.E. Specific features of the behaviour of targets under negative pressures created by a picosecond laser pulse // Quantum Electronics. 2013. V. 43. No. 3. P. 246–251.



Электрон-ионная релаксация энергии



Время электрон-ионной релаксации по энергии (теі) и время прохождения звуковой волны на расстояние, равное толщине прогретого слоя мишени, (*т*_s) в зависимости от температуры электронов в этом слое: штриховая линия – оценка времени теі по расчетным значениям коэффициента G_{еі} [Smirnov 2022] при разных температурах; штрихпунктирная линия – оценка времени *т*_s; T1 – результаты расчета [Smirnov 2022]; Т2 – оценка *т*еі в рассматриваемом процессе при условии $T_s = T_{ei}$.

Smirnov N.A. Ab Initio Calculations for the Transport Properties of Metals within Boltzmann Transport Theory: From Equilibrium to Nonequilibrium Heating Regime // Phys. Rev. B. 2022. V. 106. № 2. P. 024109.

Семенов А.Ю., Абросимов С.А., Стучебрюхов И.А., Хищенко К.В. Изучение динамики волновых процессов сжатия и расширения в палладии при пикосекундном лазерном воздействии // ТВТ. 2023. Т. 61. № 4. С. 542–548.

Phase Diagram of Gold

 $\tau_L = 100 \text{ fs}$ $\lambda = 800 \text{ nm}$ $I_L = 5 \ 10^{13} \text{ W/cm}^2$

Trajectories 1–7 correspond to depth of 5, 15, 20, 30, 50, 80 and 130 nm from the target surface



Povarnitsyn M. E. et al., Phys. Rev. B **75**, 235414 (2007). Povarnitsyn M. E. et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 195002 (2009).

Pressure versus volume and temperature for zinc Hagoniots Melting 4 · Solid liquid Gas 01 Evaporation $\lg (P / 1 \text{ GPa})$ Release isentrop 2 18(T) 112K) Liquid + Gas -4 0 0 $lg(V/V_0)$ 2

Самые широкодиапазонные

Equation of State Model

General form

$$F(V,T) = F_{c}(V) + F_{a}(V,T) + F_{e}(V,T)$$

Solid phase. Elastic component (EOS at *T* = 0 K)

at
$$V < V_{0c}$$
:
 $F_c(V) = 3V_{0c} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{i} (\sigma_c^{i/3} - 1) - 3V_{0c} \sum_{i=1}^3 \frac{b_i}{i} (\sigma_c^{-i/3} - 1) + b_0 V_{0c} \ln \sigma_c$

at
$$V > V_{0c}$$
:

$$F_c(V) = V_{0c} \left[A \left(\sigma_c^m / m - \sigma_c^n / n \right) + B \left(\sigma_c^l / l - \sigma_c^n / n \right) \right] + E_{sub}$$

at
$$V = V_{0c}$$
:
 $F_c(V_{0c}) = F_{0c}$
 $P_c(V_{0c}) = -dF_c/dV = 0$
 $B_c(V_{0c}) = -VdP_c/dV = B_{0c}$
 $B'_c(V_{0c}) = dB_c/dP_c = B'_{0c}$
 $B''_c(V_{0c}) = -d(V dB_c/dV)/dB_c = B''_{0c}$

Холодная кривая гафния в широком диапазоне давлений



Линия и квадратики – результаты расчетов: А – аппроксимация этой работы; В – аппроксимация с более узким диапазоном применимости [Ломоносов и др. 2002]; К1 – квантово-статистическая модель Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками [Калиткин и Кузьмина 1975]

Ударная адиабата и границы плавления гафния



Линии – расчет по представленному в этой работе многофазному уравнению состояния: Н – ударная адиабата для сплошных образцов гафния; Т – изотерма *T* = 293 К; М – границы области плавления. Волнистой линией показано положение границы области ω–β-превращения. Значки – экспериментальные данные

Фазовая диаграмма кристалл-жидкость-газ гафния



Линии – расчет по представленному в этой работе многофазному уравнению состояния: *P*₀ – изобара нормального давления; ms – плотность твердой фазы на кривой плавления; ml – плотность жидкой фазы на кривой плавления; bl – плотность жидкой фазы при равновесии с паром; bg – плотность пара при равновесии с жидкой фазой; sp – спинодали жидкости и газа; cp – критическая точка перехода жидкость–пар. Маркеры – оценки критической точки (C1 – эта работа; C2 – [Фортов и др. 1975]; C3 – [Ломоносов и др. 2002]; C4 – [Онуфриев 2011])

Самые простые

Caloric Equation of State Model E = E(V, P) or P = P(V, E)

General form

$$P(V,E) = P_{c}(V) + \frac{\Gamma(V,E)}{V}(E - E_{c}(V))$$

Thermal component (according to Bushman & Lomonosov 1989)

$$\Gamma(V,E) = \gamma_i + \frac{\gamma_c(V) - \gamma_i}{1 + \sigma_c^{-2/3} \left(E - E_c(V)\right) / E_e}$$

$$\gamma_{c}(V) = 2/3 + (\gamma_{0c} - 2/3) \frac{\sigma_{n}^{2} + \ln^{2}\sigma_{m}}{\sigma_{n}^{2} + \ln^{2}(\sigma/\sigma_{m})}$$

 $\sigma = V_0/V$

Equation of State Model

General form

$$P(V,E) = P_{c}(V) + \frac{\Gamma(V,E)}{V}(E - E_{c}(V))$$

Elastic component (EOS at T = 0 K)

$$E_{\rm c}(V) = \frac{B_{\rm 0c}V_{\rm 0c}}{mn} \left(\frac{n\varsigma^m - m\varsigma^n}{m - n} + 1\right)$$

$$P_{\rm c}(V) = B_{\rm 0c} \frac{\varsigma^{m+1} - \varsigma^{n+1}}{m-n}$$

 $\varsigma = V_{0c}/V$

Aluminum in Shock Waves



Aluminum in Shock Waves





Куда дальше

Hf, Zr, and Hf–Zr alloy in shock waves



Давление в зависимости от удельного объема при ударном сжатии гафния, циркония и их сплава: сплошные линии результаты расчетов по представленным уравнениям состояния для образцов гафния с p₀₀ = 13.16 (H1) и 12.89 г/см³ (Н2), циркония с ρ₀₀ = 6.51 г/см³ (НЗ) и их сплава с р₀₀ = 12.83 г/см³ (Н4); маркеры – экспериментальные данные (11 – [31]; 12, 14 – [33]; 13 - [43]; I5 - [44]; I6 - [58]); волнистые линии – примерное положение нижних границ областей β-фаз гафния и циркония на ударных адиабатах.

Середкин Н.Н., Хищенко К.В. // ТВТ. 2024. Т. 62. № 4. С. 513– 517.

W in shock and release waves



Давление в зависимости от плотности при ударном сжатии и изоэнтропическом расширении вольфрама: сплошные линии ударные адиабаты для $\rho_{00} = 19.25, 18.79, 13.36, 12.64,$ 11.38, 10.99, 10.59, 9.17, 8.87, 6.64, 6.47, 6.27, 5.5, 4.85, 4.6 и 4.5 г/см³ (для кривых справа налево) по модели МЗ; штрихпунктирные линии ударные адиабаты для $\rho_{00} = 6.64$, 5.5 и 4.6 г/см³ (для кривых справа налево) по модели М1; штриховые линии – изоэнтропы разгрузки ударно-сжатых образцов с р₀₀ = 8.87 г/см³ из состояний при U = 2.7 и 3.11 км/с, рассчитанные по модели МЗ: маркеры - экспериментальные данные.

Боярских К.А., Хищенко К.В. // Известия РАН. Серия физическая. 2024. Т. 88. № 9. С. 1432–1437.

Боярских К.А., Хищенко К.В. // ТВТ. 2025. (в печати)

Применение методов роевого интеллекта для построения уравнений состояния



Иллюстрация работы алгоритма на основе метода роя частиц. По осям отложены параметры уравнения М1. Черные кружочки показывают положение частиц при *t* = 0, красный квадратик – при *t* = 728 (частицы сошлись в одну точку с требуемой точностью). Зеленый крестик определяет положение глобального минимума функционала при *t* = 728. Проиллюстрирован тот факт, что за время работы алгоритма оптимум достигнут.

Боярских К.А., Хищенко К.В. // Известия РАН. Серия физическая. 2024. Т. 88. № 9. С. 1432–1437.

Применение методов роевого интеллекта для построения уравнений состояния



Зависимость числа итераций *N*_T (за время работы алгоритма) и достигаемого наименьшего отклонения от экспериментальных данных φ^C δ_ρ в зависимости от числа частиц *N*_I. Расчеты проведены по модели M2.

> Боярских К.А., Хищенко К.В. // Известия РАН. Серия физическая. 2024. Т. 88. № 9. С. 1432–1437.

Заключение

• Предложен ряд подходов к построению моделей уравнения состояния материалов в широкой области фазовой диаграммы.

 Разработаны различные уравнения состояния различных конструкционных материалов. Эти уравнения состояния хорошо согласуются с ударно-волновыми данными.

• Полученные уравнения состояния могут быть использованы при численном моделировании процессов в веществе при высоких плотностях энергии.

Спасибо