

# КВАЗИИЗЭНТРОПИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ДЕЙТЕРИЯ И ЕГО СМЕСИ С ГЕЛИЕМ В ОБЛАСТИ ДАВЛЕНИЙ ДО 250 ГПа

*М. А. Мочалов*<sup>a\*</sup>, *Р. И. Илькаев*<sup>a</sup>, *В. Е. Фортков*<sup>b</sup>, *С. В. Ерунов*<sup>a</sup>,  
*В. А. Аринин*<sup>a</sup>, *А. О. Бликов*<sup>a</sup>, *В. А. Огородников*<sup>a</sup>, *А. В. Рыжков*<sup>a</sup>,  
*В. А. Комраков*<sup>a</sup>, *В. Г. Куделькин*<sup>a</sup>, *И. П. Максимкин*<sup>a</sup>, *В. К. Грязнов*<sup>c</sup>,  
*И. Л. Иосилевский*<sup>b</sup>, *П. Р. Левашов*<sup>b</sup>, *Д. В. Минаков*<sup>b</sup>, *М. А. Парамонов*<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Российский федеральный ядерный центр –  
 Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики  
 607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

<sup>b</sup> *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
 125412, Москва, Россия*

<sup>c</sup> *Институт проблем химической физики Российской академии наук  
 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 2020 г.,  
 после переработки 16 декабря 2020 г.  
 Принята к публикации 12 февраля 2021 г.

Представлены данные по квазиизэнтропической сжимаемости сильнонеидеальной плазмы смеси дейтерия и гелия в области давлений 150–250 ГПа в устройствах цилиндрической геометрии, а также новый результат, полученный в эксперименте с «чистым» дейтерием при давлении около 200 ГПа. Траекторию движения металлических оболочек, сжимающих плазму, регистрировали с помощью мощных импульсных источников рентгеновского излучения с граничной энергией электронов до 60 МэВ. Значения плотности плазмы дейтерия и его смеси с гелием определены по измеренным радиусам оболочек в момент их «остановки». Давление сжатой плазмы получено на основе газодинамических расчетов, учитывающих реальные характеристики экспериментальных устройств. Полученные данные подтверждают сделанный ранее во ВНИИЭФ вывод о фазовом переходе в плазме сжатого дейтерия в области давлений 150–160 ГПа и свидетельствуют о том, что этот фазовый переход сохраняется в смеси дейтерия с гелием.

DOI: 10.31857/S0044451021060092

## 1. ВВЕДЕНИЕ

К изучению свойств водорода и гелия ученые всегда проявляли повышенный интерес, так как для описания строения и эволюции астрофизических объектов необходимо знать их физические свойства в сжатом и разогретом состояниях. Исследования Юпитера, Сатурна, коричневых карликов и многочисленного отряда «внесолнечных» планет требуют информации о теплофизических свойствах сильнонеидеальной (когда отношение энергии кулоновского взаимодействия заряженных частиц к их кинетической энергии,  $\Gamma_D = Ze^2 n^{1/3} / E_k$ , много больше единицы) и частично вырожденной водородной и гелиевой плазмы [1]. Создание новых способов генерации и диагностики состояния плазмы как водорода и гелия по-отдельности, так и, в особенности, их смеси в мегабарном диапазоне давлений дает чрезвычайно важную информацию для изучения астрофизических объектов [2]. При этом основной нерешенной до настоящего времени физической проблемой и главным источником неопределенности для водород-гелиевой плазмы в диапазоне давлений  $P \sim 10^2$ – $10^3$  ГПа, температур  $T \sim 10^3$ – $10^4$  К и плотностей  $\rho \sim 1$ – $5$  г/см<sup>3</sup> является проблема возможности фазовых переходов (ФП) и сопутствующих им аномалий термодинамических свойств такой плаз-

тической энергии,  $\Gamma_D = Ze^2 n^{1/3} / E_k$ , много больше единицы) и частично вырожденной водородной и гелиевой плазмы [1]. Создание новых способов генерации и диагностики состояния плазмы как водорода и гелия по-отдельности, так и, в особенности, их смеси в мегабарном диапазоне давлений дает чрезвычайно важную информацию для изучения астрофизических объектов [2]. При этом основной нерешенной до настоящего времени физической проблемой и главным источником неопределенности для водород-гелиевой плазмы в диапазоне давлений  $P \sim 10^2$ – $10^3$  ГПа, температур  $T \sim 10^3$ – $10^4$  К и плотностей  $\rho \sim 1$ – $5$  г/см<sup>3</sup> является проблема возможности фазовых переходов (ФП) и сопутствующих им аномалий термодинамических свойств такой плаз-

\* E-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

мы. Следует подчеркнуть, что еще в начале 70-х годов в серии экспериментальных работ ВНИИЭФ [3] была зафиксирована резкая немонотонность в параметрах  $P$ - $\rho$ -траектории квазиизэнтропического сжатия водорода с двумя участками этой траектории, при низких и высоких давлениях, и с заметным скачком плотности (около 10%) при  $P \sim 300$  ГПа при переходе с одной ветви на другую, который тогда же интерпретировался как признак фазового перехода. Впоследствии результаты работы [3] были критически проанализированы и проведены дополнительные исследования сжимаемости дейтерия на новом уровне генерации и диагностики [4, 5]. Эксперименты [4, 5] подтвердили существование двух ветвей, низкого и высокого давлений, но зона перехода опустилась в район  $P \sim 150$ –160 ГПа.

Говоря о проблеме ФП в гелий-водородной смеси, следует отметить возможное существование двух принципиально различных категорий таких переходов: трансформация в условиях смеси ФП, уже существующих в чистых веществах, и ФП, существующих именно и только в смесях, — появление зон несмесимости (immiscibility) и расслоение смеси на фазы разного химического состава. Следует также подчеркнуть, что обе упомянутые категории ФП в соответствии с законами термодинамики обязаны в общем случае быть неконгруэнтными (или инконгруэнтными), т. е. допускать равновесие сосуществующих фаз с различающимся химическим составом при сохранении общего брутто-состава (см., например, работы [6, 7]). Это очевидно для случая зон несмесимости и особенно важно для проблемы существования «плазменного» ФП в гелий-водородной смеси планетарных пропорций [8], поскольку при трансформации ФП в условия планетарных смесей помимо параметров фазовых границ существенно меняется их топология и, следовательно, как расположение, так и свойства критической точки (см., например, работу [9]). В частности, хорошо известная одномерная  $P$ - $T$ -зависимость межфазной границы в «чистых» веществах превращается в случае смеси в двумерную  $P$ - $T$ -зону с дополнительными «концевыми» точками (end-points) — максимумами температуры, давления и отклонения химического состава у сосуществующих фаз.

Все сказанное выше определяет главные вопросы, поставленные перед экспериментом, использующим технику квазиизэнтропического сжатия плотной горячей плазмы:

- как трансформируется в плотной горячей гелий-водородной смеси аномалия типа ФП, изучавшаяся в работах [3–5]?

- как проявляется и возможно ли зафиксировать в результатах эксперимента существование упомянутых выше зон несмесимости, предсказанных теоретически?

- реализуются ли в этой смеси помимо аномалии [3–5] иные варианты ФП, предсказывавшиеся в теоретических работах?

Структура данной статьи следующая. В разд. 2 перечислены особенности экспериментальной методики генерации и диагностики дейтерий-гелиевой плазмы. Далее детально описываются экспериментальные данные (плотность плазмы), дополненные параметрами сжатой плазмы, полученными из газодинамических расчетов экспериментальных устройств с исследуемым веществом. Наконец, в последней части обсуждаются результаты сравнительного расчета параметров изэнтропического сжатия чистого  $D_2$  и смеси  $D_2 + He$  в рамках двух теоретических подходов: «химической модели плазмы» (код SANA [10]), традиционно сопровождающей интерпретацию экспериментальных данных ВНИИЭФ по динамическому сжатию дейтерия, гелия и других газов [4, 5, 11–16], и строгого подхода *ab initio* — квантовой молекулярной динамики (quantum molecular dynamics, QMD), см., например, работы [17, 18], последовательно учитывающей квантовые эффекты динамики электронов совместно с эффектами кулоновской неидеальности плазмы. Состояния водорода и гелия, близкие к предполагаемым в планетах-гигантах Солнечной системы, Юпитере и Сатурне, уже достаточно давно воспроизводятся в РФЯЦ-ВНИИЭФ в экспериментах по квазиизэнтропическому сжатию газообразных дейтерия и гелия [11–16], а достигнутый диапазон параметров в настоящее время расширен до уникально высокой плотности  $15 \text{ г/см}^3$  при давлениях до  $P \approx 20$  ТПа. В то же время аналогичные экспериментальные данные по сжимаемости смеси водорода (дейтерия) и гелия практически отсутствуют.

В настоящей работе с использованием рентгенографического комплекса РФЯЦ-ВНИИЭФ [19] получены новые данные по квазиизэнтропической сжимаемости смеси дейтерия с гелием, а также проведен дополнительный эксперимент по сжимаемости «чистого» дейтерия при давлении  $P \sim 200$  ГПа с использованием новой цилиндрической конструкции. Также в работе проведен критический анализ некоторых экспериментов с водородом (дейтерием), выполненных ранее во ВНИИЭФ в области мегабарных давлений [3]. Помимо общезначимого интере-

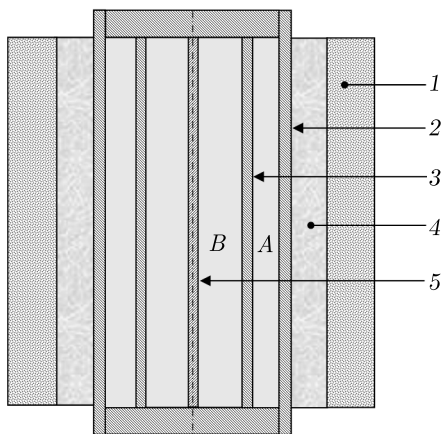


Рис. 1. Цилиндрическое устройство с равномерным профилем давления в полости сжатой плазмы [20]

са такие данные крайне важны для калибровки существующих моделей уравнений состояния чистых газов и их смесей в широкой области фазовых состояний.

## 2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

В экспериментах настоящей работы использована конструкция цилиндрического экспериментального устройства [20], вдоль оси которого расположен цилиндрический металлический стержень (рис. 1).

Устройство содержит заряд цилиндрического взрывчатого вещества (ВВ) 1 (explosive), охватывающий корпус 2, внутри которого коаксиально размещена дополнительная цилиндрическая оболочка 3. Таким образом, в устройстве конструктивно образованы две коаксиальные полости, А и В, для их заполнения исследуемым газом. Корпус 2 устройства изготовлен из высокопрочной стали, способной выдерживать высокое начальное давление газа, он деформируется в упругой области без разрушения. Оболочка 3 также изготовлена из стали. Для изменения степени сжатия газа часть ВВ может заменяться прокладкой из диэлектрика 4. Для снижения кумуляции энергии в полости В, приводящей к росту давления сжатой плазмы, в конструкции вдоль оси закреплен металлический цилиндрический стержень 5. При наличии стержня отраженная волна формируется не в «особой» области при  $R = 0$ , а на границе  $R(\text{rod})$ , где  $R(\text{rod})$  — радиус стержня. Тем самым уменьшается амплитуда отраженной ударной волны, снижается геометрическая кумуляция энергии и выравнива-

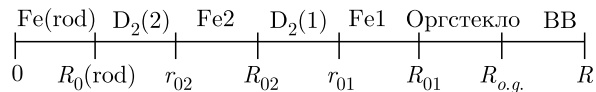


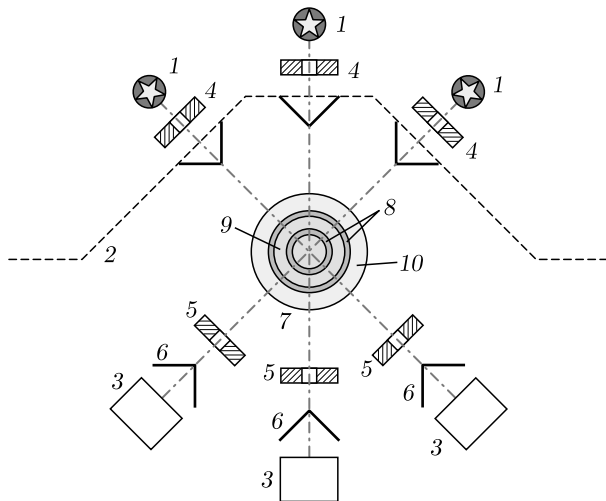
Рис. 2. Геометрия цилиндрического экспериментального устройства в экспериментах с дейтерием и его смесью с гелием:  $R_0(\text{rod})$  — начальный радиус стального стержня,  $r_{01}$  и  $R_{01}$  — параметры первого каскада,  $r_{02}$  и  $R_{02}$  — параметры второго каскада,  $R_{o.g.}$  — внешний радиус оболочки из оргстекла

ется распределение давления по радиусу полости со сжатой плазмой. Металлический стержень с начальным радиусом  $R(\text{rod}) = 4.5$  мм изготовлен из стали.

Другая особенность двухкаскадной конструкции заключается в том, что металлогазовая смесь, возникающая при выбросе частиц металлической пыли [21] с внутренней поверхности внешней оболочки 2, оказывается локализованной в полости А и не проникает во внутреннюю полость В, в которой исследуемый газ сжимается серией ударных волн и плавно сходящейся к центру оболочкой 3. Геометрия экспериментальных устройств для исследования сжимаемости дейтерия и его смеси с гелием приведена на рис. 2. Впервые данная конструкция была использована при измерении квазиизэнтропической сжимаемости дейтерия в работе [5].

В настоящей работе в данной постановке проведен эксперимент М9 по исследованию сжимаемости дейтерия и два эксперимента, М10 и М11, со смесью дейтерия (80 %) и гелия (20 %). Заполнение камеры дейтерием проводилось с использованием металлгидридного источника [22]. Величина давления в процессе заполнения измерялась датчиком S-10 фирмы WIKA (класс точности 0.25). Температура контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, расположенной внутри трубопровода, использованного для напуска газов. Давление газа в полостях оболочек 1 и 2 (см. рис. 1) было одинаковым. В экспериментах со смесью напуск газа в камеру проводился последовательно: сначала от термокомпрессора подавался гелий с известными параметрами  $P_1$  и  $T_1$ , затем — дейтерий. Конечное состояние для такой смеси известно — параметры  $P$  и  $T$  измеряются, но неизвестна плотность  $\rho_0$ . Для ее определения учитывалось, что после напуска второй газовой компоненты (дейтерия) парциальное давление первой компоненты изменяется изохорически и составляет величину

$$P^* = P_1 T / T_1. \tag{1}$$



**Рис. 3.** Схема эксперимента: 1 — источники рентгеновского излучения [19]; 2 — защитное сооружение; 3 — регистраторы; 4, 5 — коллиматоры (Pb); 6 — конусы (Al); 7 — экспериментальное устройство; 8 — оболочки; 9 — газ; 10 — заряд ВВ

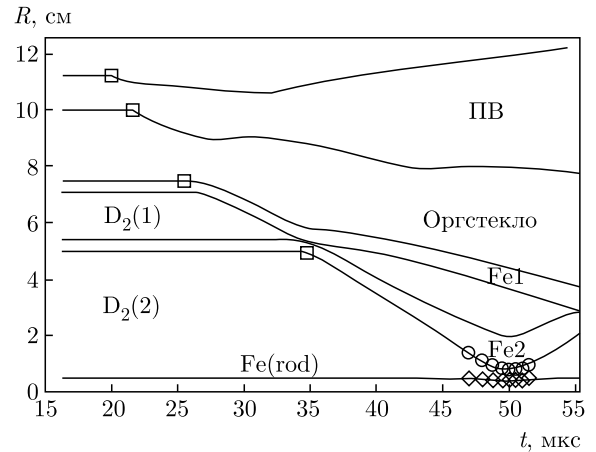
Тогда из закона Дальтона следует, что

$$P_2 = P - P^*. \quad (2)$$

Таким образом, для гелия и дейтерия вычислены начальное давление и начальная температура: соответственно  $(P^*, T)$  и  $(P_2, T)$ . Окончательно плотность смеси вычислялась с учетом сжимаемости газов на основании известных табличных данных: для гелия — по результатам работы [23] и для дейтерия — [24]. Характеристики устройств и условия проведения опытов приведены в табл. 1.

Эксперименты выполнены на рентгенографическом комплексе РФЯЦ-ВНИИЭФ с использованием оптико-электронной системы регистрации. Схема экспериментов показана на рис. 3.

Теневое изображение границ оболочек, сжимающих исследуемый газ, получено при одновременном использовании тормозного излучения трех мощных бетатронов 1 с граничной энергией электронов 60 МэВ [19]. Бетатроны расположены под углами  $45^\circ$  друг к другу в защитном бетонном сооружении 2 и работают в режиме последовательной генерации трех импульсов рентгеновского излучения длительностью 150–180 нс. В опыте использовалась индивидуальная оптико-электронная система детектирования 3, имеющая динамический диапазон регистрации  $10^3$ , которая активируется синхронно с импульсами бетатрона, что позволяет получать в каждой проекции три независимых рентгеновских изображения. В качестве преобразователей рентгеновско-



**Рис. 4.** Экспериментальные данные и рассчитанные  $R(t)$ -диаграммы. Эксперимент: квадраты — электроконтактная методика; кружки — внутренняя граница оболочки второго каскада Fe2 (ВГО2); ромбы — граница стального стержня Fe(rod), ПВ — продукты взрыва. Сплошные линии — расчет, в области дейтерия использовано УРС из работы [26]

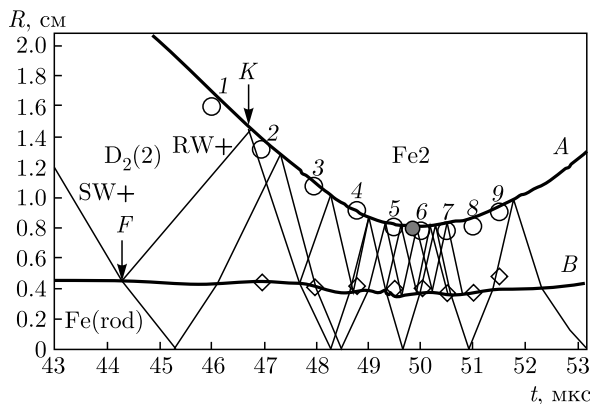
го излучения в видимое в данной системе использовались монокристаллы йодистого натрия и силикат лютеция. Для устранения влияния рассеянного излучения на высокочувствительные детекторы 3 размер поля регистрации в каждой из трех проекций ограничивается свинцовыми коллиматорами 4. Для защиты бетатронов 1 и оптико-электронных регистраторов рентгеновского излучения 3 применены алюминиевые конусы 5. Обработка экспериментальных рентгенограмм выполнена функциональным методом [25].

**Эксперимент М9 (дейтерий).** Сравнение экспериментальных данных и траекторий  $R(t)$ , рассчитанных с использованием уравнения состояния (УРС) дейтерия ВНИИЭФ [26], показано на рис. 4.

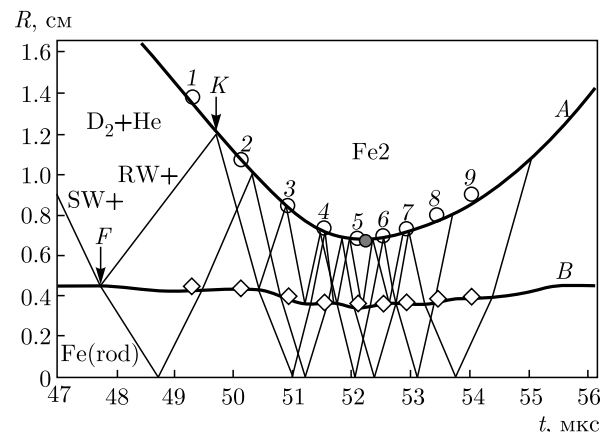
Подбор параметров расчетной схемы экспериментальной конструкции для этого и всех последующих экспериментов проводился по результатам тестирования оболочек на их начальной стадии движения (квадраты), когда влиянием исследуемого газа можно пренебречь. Рассчитанные траектории  $R(t)$ , приведенные на рис. 4, хорошо описывают экспериментальные данные, включая фазу разлета оболочки. Отличие рассчитанного радиуса остановки  $R_{min} = 0.808$  см от значения  $R_{exp} = 0.781$  см, полученного из результатов обработки рентгенограмм, составляет примерно 3.5%. Для большей наглядности результатов этого эксперимента на рис. 5 показаны фрагменты  $R(t)$ -диаграмм внутренней границы

**Таблица 1.** Характеристики устройств и условия проведения опытов ( $M_{expl}$  — масса ВВ,  $T$  — температура смеси газов,  $P_{He}$  — начальное давление гелия,  $P$  — суммарное давление смеси,  $\rho_0$  — плотность смеси)

ОПЫТ	$R_{o,g}$ , мм	$M_{expl}$ , кг	$r_{02}$ , мм	$R_{02}$ , мм	$T$ , °С	$P_{He}$ , атм	$P$ , атм	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>
М9	100	24	50	54	19.6	—	255.6	0.0359
М10	122.5	18	45	49	30.2	53.7	267.7	0.0396
М11	100	24	45	49	12.7	50.2	251.1	0.0386



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Фрагмент  $R(t)$ -диаграмм для эксперимента с дейтерием вблизи момента максимального сжатия. Эксперимент: пустые кружки — ВГО2; ромбы — граница стального стержня. Расчет: тонкие сплошные линии — ударные волны, в области газа использовано УРС дейтерия [26]; SW+ — первая ударная волна; RW+ — первая отраженная ударная волна,  $F$  — момент фокусировки первой ударной волны,  $K$  — момент отражения ударной волны от движущейся оболочки Fe2; 1–9 — регистрируемые фазы сжатия, красная точка — максимальное сжатие, толстые сплошные линии — расчет для ВГО2 (A) и для внешней границы стального стержня (B)



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных и рассчитанных  $R(t)$ -данных в опыте М10 со смесью дейтерия и гелия. Обозначения, как на рис. 5

оболочки второго каскада (ВГО2) и внешней границы стального стержня Fe(rod) вблизи момента максимального сжатия.

Как следует из постановки эксперимента, первоначально дейтерий сжимается в ударной волне. На рис. 5 приведены рассчитанные для данного устройства ударные волны, циркулирующие во внутренней полости оболочки Fe2. Чтобы не загромождать рисунок, ударные волны в области оболочки Fe2 не показаны. Как видно на рис. 5, первая ударная волна SW+ в момент времени  $F$  достигает границы стержня  $R(\text{rod})$  и отражается, а в момент контакта первой отраженной ударной волны RW+ с внутренней границей оболочки Fe2 в состоянии  $K$  плазма оказывается уже дважды сжатой. Как показал

анализ выполненных расчетов, число ударных волн, сжимающих плазму дейтерия в устройствах настоящей работы, достигает 20–25. Таким образом, в серии ударных волн, циркулирующих между стержнем Fe(rod) и внутренней границей оболочки Fe2, происходит трансформация ударно-волнового сжатия плазмы дейтерия в квазиизэнтропическое. Аналогичные процессы характерны и для сжатия смеси дейтерия с гелием в использованных устройствах (см. ниже).

**Эксперименты М10 и М11 ( $D_2 + He$ ).** Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными траекториями  $R(t)$  для эксперимента М10 со смесью дейтерия (80 % массы) и гелия (20 % массы) в области максимального сжатия показано на рис. 6. Как видно на рис. 6, экспериментальные и рассчитанные данные для этого устройства хорошо согласуются друг с другом.

При исследовании свойств плазмы смеси дейтерия (80 %) и гелия (20 %) в области более высоких давлений в эксперименте М11 для взрывного нагружения был использован заряд ВВ массой 24 кг в тротиловом эквиваленте. Экспериментальные дан-

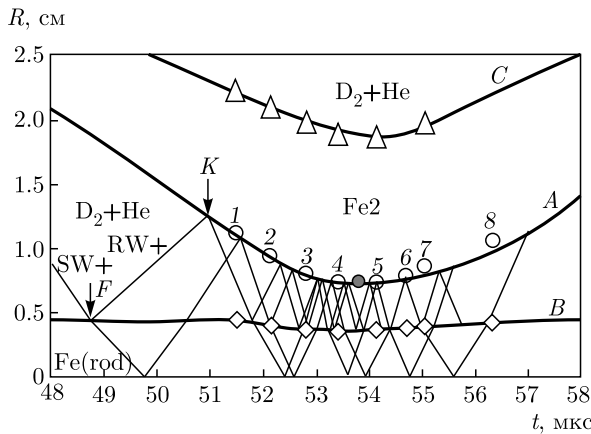


Рис. 7. (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных и рассчитанных  $R(t)$ -данных в опыте M11 со смесью дейтерия и гелия. Обозначения, как на рис. 5. Наружная граница оболочки второго каскада Fe2 (НГО2):  $\Delta$  – эксперимент,  $C$  – расчет

ные и рассчитанные траектории  $R(t)$  с использованием УРС ВНИИЭФ для гомогенной смеси для этого эксперимента в области максимального сжатия показаны на рис. 7 и хорошо согласуются друг с другом.

Давление в плазме сжатой смеси дейтерия и гелия определялось из газодинамических расчетов с учетом реальных термодинамических и прочностных свойств всех элементов экспериментальных устройств и их УРС. Расчет характеристик экспериментальных устройств выполнен по одномерной газодинамической программе [27], предназначенной для численного моделирования неустановившихся движений сплошной среды и тестированной по экспериментальным данным, полученным в России и за рубежом. В расчетах для элементов конструкции и ВВ использованы УРС, введенные в газодинамический комплекс ВНИИЭФ. В расчетах компонентов смеси для дейтерия использовалось полуэмпирическое УРС [26], построенное по экспериментальным данным [3]. Для гелия УРС ВНИИЭФ в табличной форме рассчитано Хрусталевым (ВНИИЭФ) по модифицированной модели сжимаемого коволюма [26, 28].

Для расчета термодинамических параметров смеси газов, для которых наиболее справедливо допущение о перемешивании компонентов на молекулярном уровне, использована парциальная модель, в которой для расчета давления и энергии используются следующие соотношения [29]:

$$P(\rho, T) = \sum_{i=1}^N P_i(\rho_i, T), \quad (3)$$

$$E(\rho, T) = \sum_{i=1}^N \alpha_i E_i(\rho_i, T), \quad (4)$$

где  $P$  – давление,  $E$  – удельная внутренняя энергия,  $T$  – температура,  $\rho_i$  – парциальные плотности,  $\alpha_i$  – массовые концентрации компонентов. Для учета влияния упругопластических свойств стальных оболочек использована дислокационная модель [30], учитывающая затухание упругого предвестника и релаксацию сдвиговых напряжений в волнах нагружения. Дополнительно в газодинамическом расчете учитывалась возможность хрупкого разрушения для оболочек.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ ДАННЫХ

Основным критерием истинности получаемого в расчетах давления является удовлетворительное описание всей  $R(t)$ -траектории движения оболочки экспериментального устройства. Окончательный подбор параметров расчетной схемы экспериментальной конструкции проводился по результатам рентгенографирования оболочки на ее начальной стадии движения, когда влиянием исследуемого газа можно пренебречь. Учитывались данные тестовых экспериментов по регистрации движения ударных волн по элементам экспериментального устройства. Из расчетов конструкций кроме  $R(t)$ -диаграмм получены также распределения давлений  $P(R)$  и температур  $T(R)$  в плазме по радиусу полости. Для оценки основных термодинамических параметров сжатой плазмы авторы использовали значения давления и температуры в плазме дейтерия и его смеси с гелием в момент ее максимального сжатия, полученные усреднением расчетных значений  $P(R)$  и  $T(R)$  по массе.

Как следует из анализа полученных данных, в эксперименте M9 (см. рис. 4 и 5) плазма дейтерия сжата до плотности  $\rho_{exp} = 2.1 \pm 0.2$  г/см<sup>3</sup> давлением  $P = 198$  ГПа при температуре  $T = 4410$  К.

Для экспериментов со смесью дейтерия и гелия, M10 и M11 (см. рис. 6 и 7), результаты расчетов по УРС РФЯЦ-ВНИИЭФ для гомогенной смеси демонстрируют хорошее согласие с данными опытов, что позволило использовать их для оценки давлений. В эксперименте M10 измерена плотность сжатой плазмы гомогенной смеси дейтерия и гелия  $\rho_{exp} = 1.92 \pm 0.15$  г/см<sup>3</sup> при давлении  $P = 165$  ГПа и

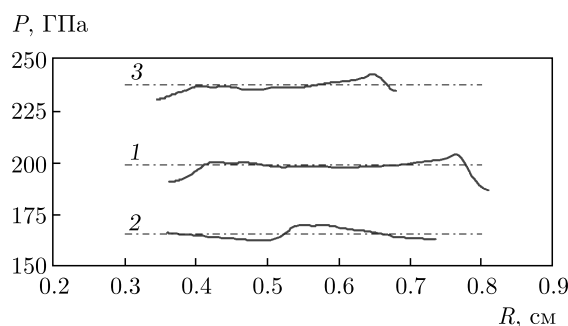
**Таблица 2.** Состояния дейтерия и смеси газов в точке фокусировки  $F$  за первой ударной волной и в точке максимального сжатия. В столбцах индексами « $foc$ » и « $stop$ » отмечены параметры, соответствующие моментам прихода ударной волны на границу стержня  $R(\text{rod}) = 0.45$  см и максимального сжатия плазмы

Опыт	$t_{foc}$ , мкс	$\rho_{foc}$ , г/см <sup>3</sup>	$P_{foc}$ , ГПа	$T_{foc}$ , К	$t_{stop}$ , мкс	$\rho_{stop}$ , г/см <sup>3</sup>	$P_{stop}$ , ГПа	$T_{stop}$ , К
M9	44.25	0.2470	2.643	1815	49.91	$2.10 \pm 0.20$	198	4410
M10	48.70	0.2187	1.153	1400	53.70	$1.92 \pm 0.15$	165	4477
M11	47.70	0.2348	1.424	1577	52.09	$2.26 \pm 0.15$	237	5058

температуре  $T = 4477$  К. В эксперименте M11 однородная смесь дейтерия и гелия сжата до плотности  $\rho_{exp} = 2.26 \pm 0.15$  г/см<sup>3</sup> давлением  $P = 237$  ГПа при температуре  $T = 5058$  К. Как видно на рис. 5–7, в момент времени  $F$  первая ударная волна SW+ достигает границы стержня  $R(\text{rod})$  и отражается. Рассчитанные состояния ( $r_{foc}$ ,  $P_{foc}$ ,  $T_{foc}$ ) дейтерия и смеси дейтерия с гелием на момент времени прихода ударной волны на границу стержня  $R(\text{rod})$  приведены в табл. 2. Там же указаны термодинамические параметры плазмы в состоянии максимального сжатия.

Наличие дополнительного адиабатического сжатия плазмы оболочкой, кумуляции термодинамических параметров за фронтом сходящейся ударной волны и ее поглощения последующими волнами на этапе движения к центру устройства приводит к тому, что в некоторый момент времени начинается квазиизэнтропическое сжатие плазмы. По крайней мере начиная с состояния  $K$ , когда исследуемая плазма оказывается дважды сжатой, и во все последующие моменты времени получаемые экспериментальные данные можно отнести к результатам измерения квазиизэнтропической сжимаемости плазмы. Наличие стального стержня, расположенного по оси использованных экспериментальных устройств, снижает геометрическую кумуляцию и выравнивает профиль давления в полости сжатой плазмы. Как показывает анализ, только в самом начале процесса сжатия в использованных устройствах имеет место кумуляция энергии и отклонение профилей давления от усредненных по массе значений достигает 10%, а в состояниях, близких к максимальному сжатию, не превышает 4%. Это наглядно видно на рис. 8, где приведены рассчитанные распределения давлений по радиусу оболочек на момент максимального сжатия для трех описанных конструкций.

Параметры плазмы водорода [3], дейтерия и смеси газов, полученные в настоящей работе в экспериментах M9–M11 при максимальном сжатии и в

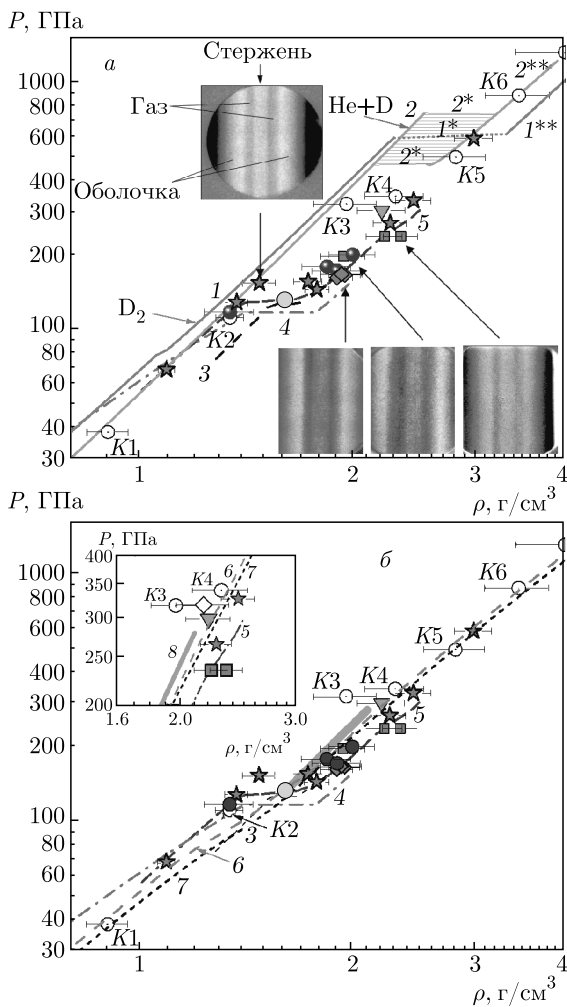


**Рис. 8.** Распределения давления по радиусу в плазме газов при максимальном сжатии. Расчет — УРС дейтерия [26]: 1 —  $P = 198$  ГПа (опыт M9); 2 —  $P = 165$  ГПа (опыт M10); 3 —  $P = 237$  ГПа (опыт M11)

ряде состояний после двукратного сжатия с установившимся профилем давлений, приведены на рис. 9 вместе с экспериментальными данными по сжимаемости дейтерия из работ [4, 5]. Экспериментальная плотность из работ [3] при переходе от водорода к дейтерию удвоена. Дополнительно на рисунке приведена точка по сжимаемости дейтерия (зеленый треугольник), полученная группой С. Б. Кормера, и не опубликованная ранее<sup>1</sup>). На рис. 9а показаны также типичные рентгенограммы проведенных опытов на моменты максимального сжатия.

Для удобства сравнения с экспериментальными данными ряд расчетов, модельных и *ab initio*, приведен отдельно на рис. 9а и 9б. Как видно на рис. 9, с учетом экспериментальной ошибки сжимаемость смеси дейтерия с небольшой добавкой гелия в экспериментах M10 и M11 практически не отличается от сжимаемости чистого дейтерия. Из общей гладкой зависимости  $P(\rho)$ , приведенной на рис. 9, выпадает одна точка (состояние  $K3$ ) из работ [3]. При сохранении положения этой точки по плотности сжатой

<sup>1</sup> Частное сообщение сотрудника ВНИИЭФ А. П. Толочко (1926–2009).



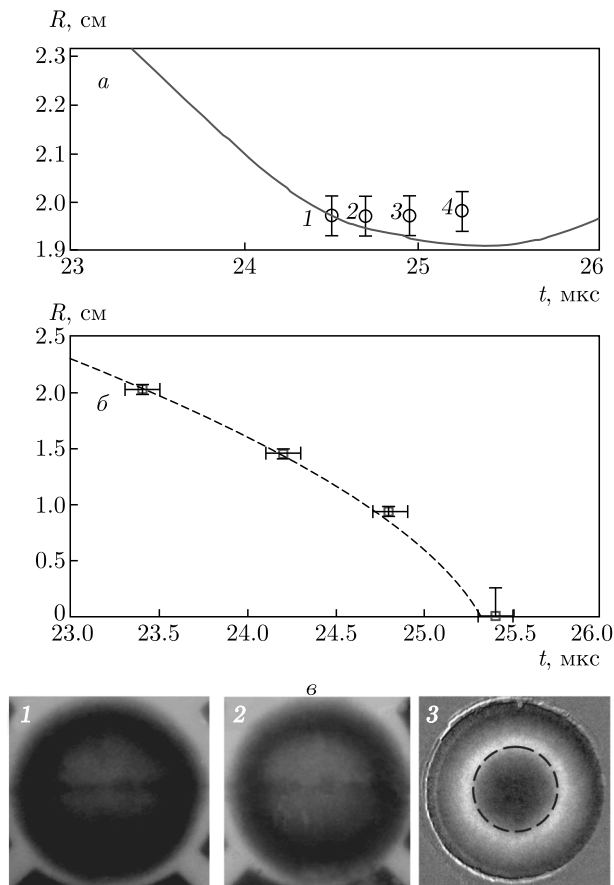
**Рис. 9.** (В цвете онлайн) Зависимости давления от плотности в квазиизэнтропически сжатом дейтерии и его смеси с гелием. Эксперимент: красные звездочки — [4, 5]; пустые кружки — [3]; зеленый треугольник — не опубликованная ранее точка по сжимаемости дейтерия, полученная группой Кормера. Настоящая работа: синие кружки — дейтерий (опыт M9); красные ромбы и квадраты — опыты соответственно M10 и M11 для смеси  $D_2 + He$ . Расчеты: 1, 1\*, 1\*\* — изэнтропа дейтерия ( $S = 29.5$  Дж/г·К) с участком фазового перехода 1\* (УРС SAHA [5]); 2, 2\*, 2\*\* — изэнтропа смеси, опыт M11, ( $S = 23.7$  Дж/г·К) с межфазной зоной (УРС SAHA, настоящая работа); 3 — изотерма водорода  $T = 1500$  К [31]; 4 — изотерма водорода  $T = 5000$  К [32]; 5 — изэнтропа (REMC-модель) [33]; 6 — изэнтропа дейтерия из точки  $F$  (QMD-модель, настоящая работа); 7 — изэнтропа смеси (QMD-модель, настоящая работа); желтый кружок — критическая точка ( $T_c = 1400$  К,  $P_c = 130$  ГПа,  $\rho_c = 1.6$  г/см<sup>3</sup>); 8 — двухфазная область диссоциативно-плазменного фазового перехода (QMD-модель [34]). На вставке: пустой ромб — скорректированное положение состояния  $K3$  из работ [3]

плазмы водорода  $\rho_{exp} = 0.98 \pm 0.08$  г/см<sup>3</sup> в цитируемых работах [3] ее положение по давлению менялось от 263 до 320 ГПа. С учетом неопределенности состояния  $K3$  мы провели газодинамические расчеты состояний водорода для всех устройств из работ [3] с помощью современных методов на базе моделей УРС РФЯЦ-ВНИИЭФ, которые используем при анализе результатов и в настоящей работе. Анализ полученных данных показал, что рассчитанные значения по плотности для всех устройств хорошо согласуются с данными из работ [3], но в состоянии  $K3$  отличие рассчитанной плотности сжатой плазмы водорода от экспериментального значения составляет около 12%. Чтобы понять причину такой разницы, мы проанализировали согласие рассчитанных и экспериментальных  $R(t)$ -данных для этого устройства, взятых из архива ВНИИЭФ. Результаты этого анализа показаны на рис. 10. Как видно на рис. 10б, расчет с использованием современных подходов хорошо описывает движение оболочки экспериментального устройства без газа.

Однако для серии из четырех экспериментов (точки 1–4 на рис. 10а) по сжимаемости водорода (состояние  $K3$ ) расчет согласуется только с положением оболочки в момент первого рентгенографирования (точка 1 на рис. 10а), который, как видно на рисунке, не является моментом максимального сжатия. Из расчета по УРС водорода [26] следует, что в момент максимального сжатия ( $t = 25.39$  мкс) минимальное значение радиуса остановки оболочки составляет величину  $R_{calc} \approx 1.908$  см, и плазма водорода оказывается сжатой до плотности  $\rho = 1.08$  г/см<sup>3</sup> давлением  $P = 319$  ГПа. С учетом проведенного анализа положение точки в  $P$ – $\rho$ -координатах, соответствующее состоянию  $K3$ , было скорректировано. Полученные в расчете значения плотности  $\rho = 1.08$  г/см<sup>3</sup> и давления  $P = 319$  ГПа показаны на вставке к рис. 9б и определяют новое положение состояния  $K3$  на фазовой диаграмме.

На оценку сжимаемости водорода в состоянии  $K3$  [3] могло повлиять качество рентгенографических изображений сферических полостей, полученных на пределе технических возможностей экспериментальной техники в 70-х годах прошлого века. Для сравнения на рис. 10в показаны две оригинальные рентгенограммы из экспериментов по измерению сжимаемости водорода в состоянии  $K3$  [3] и изображение сжатой плазмы дейтерия с использованием современной техники. Исходя из проведенного анализа, следует признать, что в состоянии  $K3$  [3], по-видимому, не удалось измерить полость обо-





**Рис. 10.** а)  $R(t)$ -диаграммы движения внутренней границы оболочки в экспериментальном устройстве для измерения сжимаемости водорода в состоянии  $K3$ : значки — эксперименты [3]; кривая — расчет по УРС водорода [26]. б) Движение внутренней границы оболочки без газа: значки — эксперименты, штрихи — расчет. в) Рентгенограммы 1 и 2 из работы [3] соответствуют точкам 1 и 2 на рис. а; 3 — изображение сферической оболочки с использованием современной техники (штрихи — граница газ-металл)

лочки в момент максимального сжатия, а опубликованное значение плотности сжатой плазмы водорода не соответствует максимальному давлению. Подтверждает этот вывод и результат неопубликованного ранее эксперимента по измерению сжимаемости дейтерия, выполненного группой Кормера. Следует также признать завышенной и точность экспериментальной ошибки результатов работ [3] для всех экспериментальных устройств.

#### 4. РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ ИЗЭНТРОПИЧЕСКОГО СЖАТИЯ В РАМКАХ ХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЛАЗМЫ

Для анализа результатов экспериментов, выполненных в данной работе, были проведены рас-

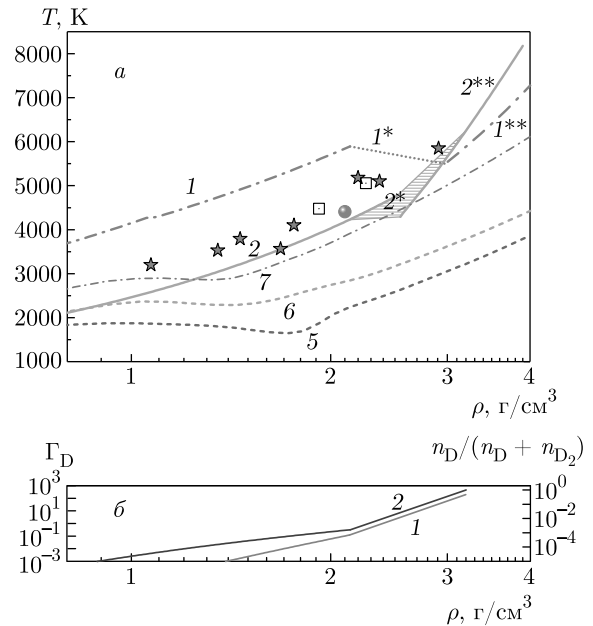
четы изэнтропического сжатия плотного горячего гелий-дейтериевого флюида по теоретической модели SAHA, развитой для описания термодинамики сильнонеидеальной плазмы [35, 36]. Для этой цели был использован модифицированный вариант модели SAHA, хорошо зарекомендовавший себя при описании результатов предыдущей серии экспериментов по динамическому сжатию плазмы дейтерия до давлений 5000 ГПа [5, 11]. Несомненным достоинством модели SAHA применительно к расчетам плазмы гелий-дейтериевой смеси является то, что в рамках этого подхода («химическая модель плазмы») непосредственно рассчитываются параметры именно смеси, а не используются какие-либо полуэмпирические «правила смешивания» типа уравнений (3) и (4). В рамках подхода SAHA плотная и горячая плазма гелий-дейтериевой смеси описывается как многокомпонентная равновесная сильно-взаимодействующая («неидеальная») смесь атомов, молекул, атомных и молекулярных ионов и электронов. Последние могут быть частично вырожденными. Такой расчет фактически сводится к решению системы нелинейных уравнений одновременно химического и ионизационного равновесия гелия и дейтерия с учетом различных «поправок на неидеальность», учитывающих как эффект кулоновского взаимодействия ионов и электронов, так и влияние интенсивного короткодействующего отталкивания всех участников смеси (эффект «собственного объема»). При этом во всех указанных выше реакциях учитывается сдвиг равновесия вследствие частичного вырождения электронов.

Завершает эту громоздкую процедуру дополнительный расчет возможности фазовых расслоений системы. Следует подчеркнуть, что помимо расчета простых ван-дер-ваальсовых переходов типа газ-жидкость [37] (в неконгруэнтном варианте [8]) методология химической модели плазмы и, в частности, код SAHA приспособлены для описания необычных «энтропийных» (делокализационных) фазовых переходов [38] в плотном горячем гелий-водородном флюиде. В частности, это — диссоциативно-плазменный переход в водороде (дейтерии) [35], чисто плазменный переход в водороде [31] и двухстадийный плазменный переход в гелии в версии работы [39] или одностадийный, но сразу с двукратной ионизацией гелия в версии работы [40]. Это особенно важно для изучаемого в настоящей работе фазового перехода в плотном горячем гелий-дейтериевом флюиде, который, по нашим оценкам, должен быть одновременно и энтропийным, и неконгруэнтным.

Расчет по модели SAHA настоящей работы был проведен в режиме изэнтропы с начальными параметрами, соответствующими моменту фокусировки первой ударной волны на поверхности металлического стержня цилиндрического генератора настоящей конструкции для всех трех экспериментов, M9, M10 и M11 (состояния с индексом «*loc*» в табл. 2, см. выше). Результаты этих расчетов в сравнении с экспериментальными данными в координатах давление–плотность приведены на рис. 9. При этом указанные изэнтропы, соответствующие экспериментам на смеси M10 и M11 и стартующие из соответствующих состояний ( $\rho_{foc}$ ,  $P_{foc}$ ), оказались очень близки и по этой причине изображены на рис. 9б единой зависимостью. Изэнтропа, отвечающая эксперименту M9, оказалась близка к соответствующей изэнтропе, рассчитанной для предыдущей серии экспериментов по динамическому сжатию дейтерия [5].

Следует подчеркнуть, что, как и ранее для плазмы дейтерия [4, 5], настоящие расчеты по модели SAHA для плотного и горячего гелий–дейтериевого флюида также предсказывают наличие ФП (см. рис. 9а), но при давлениях заметно выше соответствующего скачка плотности, зафиксированного ранее [4, 5] и в настоящей работе (M9) для плазмы дейтерия. Таким образом, согласно настоящему расчету по модели SAHA, диссоциативно–плазменный ФП, предсказанный ранее для плазмы дейтерия, все еще сохраняется при добавлении к дейтерию около 20% гелия, но участок двухфазной зоны (2\* на рис. 9а) заметно смещается в область более высоких давлений, а соответствующий скачок плотности для смеси оказывается меньше, чем для чистого дейтерия. На рис. 9а участок изэнтропы смеси  $D_2 + He$  внутри двухфазной области не приведен точно. Такой расчет еще не реализован ввиду своей сложности, обусловленной помимо всего прочего неконгруэнтностью этого ФП, который к тому же является энтропийным (делокализационным) [38]. На рис. 11 показано сравнение результатов расчета температуры динамически сжатых дейтерия и смеси  $D_2 + He$  вдоль изэнтроп, соответствующих экспериментам настоящей работы.

Расчеты проведены по модели SAHA и в рамках модификации QMD-метода [17, 41]. На рис. 11 также нанесены значения рассчитанных по УРС ВНИИЭФ температур, использованные при анализе динамики элементов экспериментального устройства и в расчетах термодинамических параметров для исследованных веществ в данной работе. Обращает на себя внимание существенное различие температур



**Рис. 11.** (В цвете онлайн) а) Зависимости температуры от плотности квазиизэнтропически сжатого дейтерия и его смеси с гелием: красные звездочки ( $D_2$  [5]); красный кружок ( $D_2$ ) и квадраты (смесь) — настоящая работа. Расчеты (настоящая работа): 1, 1\*, 1\*\* — изэнтропа дейтерия ( $S = 29.5$  Дж/г·К) с участком фазового перехода 1\* (УРС SAHA); 2, 2\*, 2\*\* — изэнтропа смеси  $D_2 + He$  ( $S = 23.7$  Дж/г·К) с межфазной зоной 2\* (УРС SAHA); 5 — изэнтропа дейтерия из точки F эксперимента M9 (QMD-метод); 6 и 7 — изэнтропы смеси  $D_2 + He$  из точек F экспериментов M10 и M11 (QMD-метод). б) Параметр кулоновской неидеальности  $\Gamma_D = (e^2/kT)r_D$  (кривая 1) и степень диссоциации дейтерия в смеси вдоль изэнтропы, соответствующей эксперименту M11 по модели SAHA (кривая 2)

для дейтерия (опыт M9), рассчитанных по моделям SAHA (кривая 1) и QMD-методом (кривая 5). Промежуточное положение занимают расчеты температур для дейтерия по модели ВНИИЭФ из работ [4, 5] и настоящей работы, близкие к температурам смеси в опытах M10 и M11. Отметим удовлетворительное согласие рассчитанных двумя методами температур для смеси в опыте M11 и их отличие от рассчитанных температур для опыта M10. Расчет по модели SAHA для опыта M10 практически совпадает с расчетом для опыта M11 и поэтому здесь не приведен. Кроме того, скачок степени диссоциации в смеси дейтерия и гелия (линии 2, 2\*, 2\*\* на рис. 11) в зоне ФП, рассчитанный по модели SAHA, позволяет предположить диссоциативную природу фазового превращения, произошедшего в смеси  $D_2 + He$  в диапазоне  $P \simeq 100\text{--}300$  ГПа в настоящих экспериментах.

Все сказанное лишний раз подчеркивает исключительную важность реализации в эксперименте дополнительного (прямого или косвенного) измерения температуры исследуемого вещества. Следует еще раз подчеркнуть, что, согласно законам термодинамики [2], соотношение термического и калорического УРС веществ таково, что для всех адиабатических процессов (включая ударное и изэнтропическое сжатие и расширение) любое сколь угодно хорошее совпадение предлагаемой теории и эксперимента в измерениях «механических» свойств — давления, плотности и внутренней энергии ( $P, \rho$  и  $U$ ) — не означает для этой теории никакой точности в описании температуры испытуемого материала [6].

### 5. РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ ИЗЭНТРОПИЧЕСКОГО СЖАТИЯ СМЕСИ ДЕЙТЕРИЯ И ГЕЛИЯ В РАМКАХ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Помимо химической модели плазмы в настоящей работе были проведены расчеты параметров динамического сжатия плазмы дейтерия и гелий-дейтериевой смеси посредством QMD-метода. Методика этих расчетов в настоящей работе является развитием и продолжением методики, реализованной в работе [41] и практически повторенной в [42]. Метод QMD не использует (подобно квазихимической методике SAHA) для расчетов феноменологической информации об изучаемом веществе, такой как потенциалы ионизации, энергетические спектры возбуждений связанных комплексов и т. д. Термодинамика квантовых электронов в QMD описывается с помощью метода функционала плотности (DFT) [43]. Результатом такого расчета является неоднородное пространственное распределение электронов в поле подвижных ионов. Динамика и термодинамика последних численно моделируется в рамках молекулярной динамики [44]. Обе указанные процедуры в настоящих QMD-расчетах реализованы с использованием известного пакета VASP [7] с обменно-корреляционным функционалом в обобщенно-градиентном приближении (GGA) с параметризацией PBE [45].

В сравнении с расчетами, реализованными в [41], в расчетах настоящей работы было заметно увеличено количество моделируемых частиц (ядер и электронов), что позволило существенно повысить (вычислительную) точность. Сходимость результатов проверялась по числу атомов. Все расчеты проводились в каноническом ансамбле. Температура ионов

$T_i$  контролировалась с помощью термостата Ноэ-Гувера [44]. Равновесные термодинамические характеристики вычисляются на равновесном участке моделирования путем усреднения по конфигурациям. Это определяет статистическую погрешность моделирования. Непосредственными термодинамическими величинами, получаемыми в методе QMD в результате описанной выше процедуры атомистического моделирования, являются две главные величины — давление и внутренняя энергия как функции плотности и температуры,  $P(T, \rho)$  и  $U(T, \rho)$ . В соответствии с методом Ферми-Зельдовича [2, 46] это позволяет восстановить, во-первых, ход изэнтропы в плоскости  $P$ - $V$ , а во-вторых, темп изменения температуры вдоль этой изэнтропы. В расчетах настоящей работы использовался способ [41, 42], состоящий в интегрировании вдоль указанной выше изэнтропы известного термодинамического соотношения

$$\left(\frac{\partial \ln T}{\partial V}\right)_S = - \left(\frac{\partial U(P, V)}{\partial T}\right)_V^{-1} = - \left(\frac{\partial P(V, T)}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial U(V, T)}{\partial T}\right)_V^{-1}. \quad (5)$$

В расчетах настоящей работы для каждого эксперимента такая изэнтропа выпускалась в плоскости  $P$ - $V$  из точки  $F$  — условного начала изэнтропичности траектории динамического сжатия смеси в процессе реверберации ударных волн, где известна величина температуры —  $T_F$ . Такая изэнтропа для эксперимента с чистым дейтерием (опыт M9) представлена выше на рис. 9б. Что касается смеси, то по описанной выше методике были проведены расчеты параметров изэнтроп отдельно для дейтерия и гелия, а параметры для давления и энергии гелий-дейтериевой смеси получены с использованием приближенного алгоритма смешения по соотношениям (3) и (4). Из этих данных по энергии и давлению гелий-дейтериевой смеси были вычислены приближенные параметры  $P, \rho, T$  искомым изэнтроп для экспериментов M10 и M11. Результаты этих расчетов представлены в координатах  $P(\rho)$  на рис. 9 и в координатах  $T(\rho)$  рис. 11.

### 6. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ТЕОРИИ

Проблема существования аномалий типа ФП в плотном и горячем флюиде водорода (дейтерия) и гелия имеет давнюю и достаточно противоречивую

историю. Целый ряд работ, прежде всего использующих платформу химической модели плазмы, в течение многих лет предсказывали существование «плазменного» ФП в этих условиях (см. пионерскую работу [47] и обзоры [1, 2, 31, 39, 48]). Некоторые из этих работ [49, 50] предсказывают существование плазменного ФП (в плоскости  $P$ - $\rho$ ) в непосредственной близости к месту положения разрыва плотности квазиизэнтропического сжатия в серии экспериментов [4, 5], включая и результаты настоящей работы. В качестве примера на рис. 9а приведена изотерма  $T = 5000$  К из работы [31] (кривая 4). Что касается гелия, то предсказания плазменного ФП в плазме гелия делались как в варианте единого плазменного ФП с одномоментной двукратной ионизацией ( $\text{He} \Leftrightarrow \text{He}^{++} + 2e$ ) [40], так и в варианте двух последовательных плазменных ФП раздельно на первой и второй стадиях ионизации [39]. Также, что важно, еще в работе [51] на базе химической модели плазмы детально исследовался плазменный ФП в гелий-водородной плазме во всем диапазоне пропорций гелия, но, однако, без кого-либо учета деформации параметров этого плазменного ФП из-за его неконгруэнтности [8]. Теоретические оценки величины указанной неконгруэнтности на примере популярной в астрофизических приложениях версии плазменного ФП из работ [52, 53] показывают, что масштаб указанной неконгруэнтности может быть заметным и вполне сравнимым с эмпирической величиной «гелиевого обеднения» внешних слоев атмосферы Юпитера и Сатурна. В контексте экспериментов настоящей работы важен главный вывод из расчетов работы [51] — добавление гелия существенно «подавляет» склонность к фазовому расслоению водорода, и, в свою очередь, добавление водорода аналогично «подавляет» склонность к фазовому расслоению гелия.

Подчеркнем, что результаты настоящего эксперимента (см. рис. 9) пока не дают явного подтверждения этого правила. Изэнтропа смеси  $\text{D}_2 + \text{He}$  в диапазоне  $P \simeq 100$ – $300$  ГПа оказывается практически совпадающей с изэнтропой чистого дейтерия. Очевидно, что для прогресса в решении этой проблемы требуются дальнейшие более тщательные исследования параметров динамического сжатия смесей гелий-дейтерий с более детальной диагностикой, прежде всего с измерением температуры изэнтропически сжатой и нагретой плазмы смеси.

Если вернуться к теории, то помимо упомянутой выше химической модели плазмы достаточно категоричные утверждения о возможности фазовых расслоений в водороде (и меньше в гелии) и, соответ-

ственно, в гелий-водородной смеси были получены в последние десятилетия благодаря стремительному прогрессу вычислительной техники в рамках более строгих подходов с использованием методов прямого численного моделирования. Так, еще в 2003 г. в работе [33] с использованием метода функционала плотности в плазме водорода получались разрывные изотермы. Одна из них ( $T = 1500$  К) в качестве примера приведена на рис. 9а (кривая 3). Еще более поразительный результат уже непосредственно на изэнтропе, практически совпадающей с  $P(\rho)$ -траекторией экспериментов [4, 5], был получен в прямом моделировании водородного флюида в REMC-ансамбле [32]. Подчеркнем, что помимо разрывоподобной аномалии в ходе изэнтропы, показанной на рис. 9а (кривая 5), REMC-моделирование [32] предсказывает показательно низкий и к тому же монотонно убывающий при сжатии уровень температуры на рассчитанной изэнтропе ( $T = 800$ – $1200$  К).

Переходя к теоретическим расчетам настоящей работы, отметим, что, как и ранее [4, 5], расчеты по модели SANA предсказывают для изэнтропы дейтерия, выходящей из точки  $F$  (фокусировка первой ударной волны на границе центрального стержня), наличие двух ветвей, низкого и высокого давления, и ФП между ними, правда, при заметно более высоком давлении, чем в экспериментах [4, 5]. Важно то, что при переходе к описанию сжатия в гелий-дейтериевой смеси этот переход сохраняется, но, так же как и в расчетах работы [51], двухфазная зона перехода, во-первых, заметно сдвигается в область более высоких давлений, а во-вторых, сжимается, т. е. ветви 2–2\*\* на рис. 9а сближаются в сравнении с 1–1\*\*.

Что же касается подхода *ab initio* QMD, то, как видно из рис. 9а, изэнтропа, вычисленная в рамках этого подхода как для чистого дейтерия, так и для гелий-дейтериевой смеси, не содержит в районе 100–1000 ГПа никаких разрывов типа ФП. Однако отсюда не следует, что QMD-расчеты противоречат экспериментальным данным настоящей работы. Напротив, многие варианты подходов *ab initio* (см. обзор [54]), включая QMD и квантовый метод Монте-Карло (QMC) [34, 55], вплоть до самых последних результатов QMD- и QMC-моделирования [56, 57], уверенно предсказывают существование диссоциативно-плазменного ФП.

В работе [58] подчеркивалось, что этот ФП расположен именно в том диапазоне давлений и плотностей, где на протяжении многих лет фиксируется разрывная аномалия в экспериментах ВНИИЭФ при квазиизэнтропическом сжатии водорода (дейтерия) [3–5]. Это показано на рис. 9, где нанесены

критическая точка обсуждаемого ФП в версии работы [34] с параметрами  $T_c = 1400$  К,  $P_c = 130$  ГПа,  $\rho_c = 1.6$  г/см<sup>3</sup> и полоса его двухфазной области в диапазоне  $1000 \text{ К} \leq T \leq 3000 \text{ К}$  в версии работы [56]. Примечательно, что эта относительно узкая зона двухфазной области практически совпадает в  $P(\rho)$ -координатах с траекторией квазиизэнтропического сжатия дейтерия настоящей работы и предшествующих экспериментов [3–5] с той только принципиальной разницей, что температура вдоль указанной полосы двухфазной области с ростом давления монотонно убывает, в противоположность монотонному росту, ожидаемому вдоль изэнтропы сжатия в настоящих экспериментах. Как подчеркивалось в работах [37, 38, 58], это может быть объяснено аномальным характером термодинамики горячего плотного флюида водорода (дейтерия) в обсуждаемой зоне параметров. Эта аномальность [38], реализующаяся, в частности, как отрицательность коэффициента Грюнайзена, в общем контексте свойств плотного горячего вещества обсуждалась в [2, 59, 60]. Конкретно для водорода в диапазоне давлений 40–75 ГПа и температур 3500–7500 К наличие такой аномалии на основе существующих данных обсуждалось в работе [61]. Эта сложная проблема требует отдельного подробного анализа. Пока следует, видимо, ограничиться выводом о частичной противоречивости существующих экспериментальных и теоретических данных в обсуждаемой области [58].

## 7. ЗОНЫ НЕСМЕСИМОСТИ

Как уже подчеркивалось во Введении, при переходе от чистых дейтерия и гелия к их смеси помимо деформации и сдвига параметров уже существующих в них фазовых переходов возможен дополнительный ФП, присущий именно смеси, — появление зон несмесимости. Этот переход, по определению, является неконгруэнтным, т. е. с различием химических пропорций в сосуществующих фазах. Параметры этих зон несмесимости в гелий-водородной смеси рассчитывались неоднократно с применением, в основном, подходов *ab initio* (см. работы [62–64] и ссылки там). Эти расчеты все еще содержат большую долю неопределенности из-за высокой чувствительности параметров границы зоны расслоения к деталям приближений, принятых при вычислениях в указанных вариантах подходов. Но следует подчеркнуть, что обе точки для смеси в экспериментах М10 и М11, согласно их параметрам, приведенным в табл. 2, оказываются глубоко в двухфазной области

несмесимости, приведенной в работах [62, 64]. Более того, обсуждаемая зона несмесимости столь обширна, что изэнтропа смеси  $D_2 + He$ , реализованная в настоящих экспериментах, входит в эту зону в районе  $P \simeq 100$  ГПа и остается в этой зоне двухфазных состояний до достаточно высоких давлений (по оценкам на основе модели SANA до  $P \geq P^* \simeq 1000$  ГПа).

Подчеркнем, что, как известно [2], такой вход и выход изэнтропы в двухфазную область должен сопровождаться заметным изломом ее наклона в  $P$ - $V$ -плоскости, т. е. сжимаемости. Это обстоятельство, как и то, что и в чистом дейтерии траектория, описывающая квазиизэнтропическую реверберацию ударных волн, пересекает в этом же диапазоне параметров межфазную границу диссоциативно-плазменного фазового перехода [3–5] (см. рис. 11), с особой остротой ставит вопрос о корректности расчета газодинамики сжимаемой смеси  $D_2 + He$  с помощью УРС ВНИИЭФ, которое не содержит такого ФП. Важно, что с помощью именно этих расчетов в экспериментах настоящей работы определяется давление и оценивается температура, приведенные в табл. 2. Анализ этой проблемы ввиду своей сложности выходит за рамки настоящей статьи. Также кажется очевидной необходимость внедрения дополнительного альтернативного расчета газодинамики сжимаемой смеси  $D_2 + He$  с помощью УРС SANA с полным учетом диссоциативно-плазменного ФП в его корректной версии, полностью учитывающей неконгруэнтность фазовых превращений в гелий-водородных (дейтериевых) смесях.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе с использованием оригинальных цилиндрических устройств впервые измерена квазиизэнтропическая сжимаемость смеси дейтерия (80 % по массе) и гелия (20 % по массе) в диапазоне давлений 150–250 ГПа и «чистого» дейтерия при давлении  $P \approx 200$  ГПа. Анализ полученных данных показал, что профили термодинамических величин сжатой плазмы, определенные с использованием двухкаскадного цилиндрического экспериментального устройства, имеют при максимальном сжатии разброс не более 4%, а их рассчитанные средние величины не зависят от вариантов расчета прочностных процессов конструкции. Экспериментальные данные по квазиизэнтропической сжимаемости «чистого» дейтерия и его смеси с гелием, полученные в диапазоне давлений 150–250 ГПа на новых прецизионных устройствах, подтверждают

сделанный ранее вывод о наличии в квазиизэнтропически сжатом дейтерии ФП в области давлений 150–160 ГПа и свидетельствуют о том, что этот ФП сохраняется в смеси дейтерия с гелием. На основе современных моделей УРС, используемых в настоящее время в РФЯЦ-ВНИИЭФ, проведены анализ и коррекция результатов пионерских экспериментов группы Кормера по сжимаемости водорода, выполненных в 70-х годах прошлого века [3]. На основе этого анализа и с учетом неопубликованного ранее результата еще одного эксперимента группы Кормера по сжимаемости дейтерия показано хорошее согласие всей совокупности данных экспериментов, выполненных ранее во ВНИИЭФ, и настоящей работы.

С использованием двух теоретических моделей проведены расчеты параметров изэнтропического сжатия гелий-дейтериевой смеси. Расчеты по химической модели плазмы (код SAHA) предсказывают диссоциативно-плазменный ФП со скачком плотности, близким к экспериментальному, но при более высоких давлениях. Расчеты *ab initio* параметров  $P(\rho)$  изэнтропы на основе QMD находятся, в целом, в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными, но не воспроизводят зафиксированный в них ФП. Сравнение результатов расчета, проведенного в рамках двух теоретических подходов, показывает высокую степень неопределенности нашего знания температуры квазиизэнтропически сжатой гелий-дейтериевой смеси, в очередной раз подчеркивая острую необходимость дополнения существующей методики регистрации сжимаемости плазмы независимыми измерениями ее температуры.

Опираясь на проведенные теоретические расчеты параметров динамически сжатой плазмы смеси гелия и дейтерия, мы имеем все основания полагать, что полученные в эксперименте мегабарные состояния гелий-дейтериевой плазмы находятся глубоко в области несмесимости этих компонент — гелия и дейтерия, — уверенно предсказываемой сегодня большинством методик *ab initio*. Изучение влияния этого обстоятельства на корректный расчет газодинамики динамического сжатия является первостепенной по важности задачей для дальнейшего прогресса экспериментального подхода, традиционно развиваемого в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

**Благодарности.** Авторы признательны сотрудникам, принимавшим участие в организации, проведении экспериментов и обработке полученных данных: А. Б. Профе, А. И. Лебедеву, С. Е. Елфимо-

ву, Р. В. Борисову, Е. П. Волкову, Р. В. Тилькунову, О. А. Есину, В. В. Ковалдову, А. В. Романову, Д. П. Турутину, А. С. Пупкову, Г. С. Яндубаеву, И. А. Блинову, М. В. Логинову, Е. В. Шевнину, А. И. Гуркину. Авторы выражают благодарность А. В. Шутову за результаты газодинамических расчетов с использованием УРС SAHA, а также А. Б. Медведеву за плодотворные обсуждения проблемы аномальных термодинамических свойств плотного горячего водорода (дейтерия) в зоне мегабарных давлений.

**Финансирование.** Настоящая работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00287) и Министерства науки и высшего образования России (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785).

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Фортов *Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе*, Физматлит, Москва (2010).
2. В. Е. Фортов, *Термодинамика динамических воздействий на вещество*, Физматлит, Москва (2019).
3. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, Письма в ЖЭТФ **16**, 286 (1972); ЖЭТФ **69**, 743 (1975); ЖЭТФ **75**, 1683 (1978).
4. V. E. Fortov, R. I. Il'kaev, V. A. Arinin, V. V. Bur-tzev, V. A. Golubev, I. L. Iosilevskiy, V. V. Khrus-talev, A. L. Mikhailov, M. A. Mochalov, V. Ya. Ternovoi, and M. V. Zhernokletov, Phys. Rev. Lett. **99**, 185001 (2007).
5. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, А. О. Бликов, В. А. Огородников, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, ЖЭТФ **152**, 1113 (2017).
6. И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, *Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме*, Изд-во МФТИ, Москва (2000).
7. И. Л. Иосилевский, В. К. Грязнов, А. М. Семенов, Е. С. Якуб, Л. Н. Горохов, В. С. Юнгман, А. Ю. Башарин, М. В. Брыкин, М. А. Шейндлин, В. Е. Фортов, Изв. РАН, Энергетика **5**, 115 (2011).
8. I. Iosilevskiy, V. Gryaznov, E. Yakub, C. Ronchi, and V. Fortov, Contrib. Plasma Phys. **43**, 316 (2003).

9. И. Иосилевский, *Физика неидеальных кулоновских систем: Уравнение состояния и фазовые переходы* (in Russian), Saarbrücken, Germany, Lambert Acad. Publ. (2011).
10. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в сб. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова, Наука, Москва (2000), с. 299 [V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, in *High-Pressure Shock Compression of Solids VII: Shock Waves and Extreme States of Matter*, ed. by V. E. Fortov, L. V. Al'tshuler, R. F. Trunin, and A. I. Funtikov, Springer-Verlag, New York (2004), p. 437].
11. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, С. К. Гришечкин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. К. Грязнов, Письма в ЖЭТФ **92**, 336 (2010).
12. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Е. А. Пронин, А. А. Юхимчук, ЖЭТФ **142**, 696 (2012).
13. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Раевский, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, А. И. Давыдов, Н. Н. Анашкин, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, Н. Б. Давыдов, В. А. Комраков, А. И. Логвинов, С. Ф. Маначкин, А. В. Рыжков, Б. И. Ткаченко, А. В. Федоров, С. А. Финюшин, Д. А. Калашников, Е. А. Чудаков, Е. А. Пронин, Е. А. Бакулина, ЖЭТФ **146**, 169 (2014).
14. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, А. В. Рыжков, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **101**, 575 (2015).
15. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Письма в ЖЭТФ **107**, 173 (2018).
16. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, Письма в ЖЭТФ **108**, 692 (2018).
17. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
18. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
19. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov, D. I. Zenkov, and B. F. Tkachenko, in *11th IEEE Pulsed Power Conf.* (29 June–2 July 1997, Baltimore, Maryland, USA), *Digest of Technical Papers*, ed. by G. Cooperstein and I. Vitkovitsky, p. 1669.
20. А. О. Бликов, М. А. Мочалов, В. А. Огородников, В. А. Комраков, Патент (RU) 2471545 С1, Бюлл. изобрет. № 1, 10.01.2013.
21. В. А. Огородников, А. Г. Иванов, А. Л. Михайлов, Н. И. Крюков, А. П. Толочко, В. А. Голубев, ФГВ **34**, 103 (1998).
22. А. N. Golubkov, A. A. Kononenko, and A. A. Yulikhinchuk, Fusion Sci. Technol. **48**, 527 (2005).
23. В. В. Сычев, А. А. Вассерман, А. Д. Козлов, Г. А. Спиридонов, В. А. Цымарный, *Термодинамические свойства гелия*, ГСССД, Изд-во стандартов, Москва (1984).
24. A. Michels, W. De Graaff, T. Wassenaar, J. M. H. Levelt, and P. Louwerse, Physica **25**, 25 (1959).
25. V. A. Arinin and B. I. Tkachenko, Pattern Recognition and Image Analysis **19**, 63 (2009).
26. В. П. Копышев, В. В. Хрусталева, ПМТФ **21**, 122 (1980).
27. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, ВАНТ, сер. Методики и программы числ. решения задач матем. физ. вып. 3, 11 (1982).
28. В. П. Копышев, ПМТФ **12**(1), 119 (1971).
29. Л. И. Седов, *Механика сплошной среды*, Наука, Москва (1984).
30. И. Р. Трунин, С. В. Корицкая, В. Арнолд, Препринт 75-2000, Саров (2000).
31. S. Scandolo, Proc. Nat. Acad. Sci. **100**, 3051 (2003).
32. D. Beule, W. Ebeling, A. Forster, H. Juranek, R. Redmer, and G. Ropke, Contrib. Plasma Phys. **39**, 21 (1999).
33. V. S. Filinov, P. R. Levashov, A. V. Botsan, M. Bonitz, and V. E. Fortov, J. Phys. A **42**, 214002 (2009); P. R. Levashov, V. S. Filinov, A. Botan, M. Bonitz, and V. E. Fortov, J. Phys. Conf. Ser. **121**, 012012 (2008).
34. W. Lorenzen, B. Holst, and R. Redmer, Phys. Rev. B **82**, 195107 (2010).
35. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, J. Phys. A **42**, 214007 (2009).

36. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, *Contrib. Plasma Phys.* **50**, 77 (2010).
37. I. Iosilevskiy, in *Physics of Extreme States of Matter*, ed. by V. Fortov et al., IPCP RAS, Russia, Chernogolovka (2013), p. 136, arXiv:1403.8053v3.
38. I. L. Iosilevskiy, *J. Phys. Conf. Series* **653**, 012077 (2015).
39. W. Ebeling, A. Förster, V. E. Fortov, V. K. Gryaznov, and A. Ya. Polishuk, *Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas*, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart–Leipzig (1991) [В. Эбеллинг, А. Фёрстер, В. Фортов, В. Грязнов, А. Полищук, *Термофизические свойства горячей плотной плазмы*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, Москва–Ижевск (2007)].
40. C. Winisdoerffer and G. Chabrier, *Phys. Rev. E* **71**, 026402 (2005).
41. A. V. Chentsov and P. R. Levashov, *Contrib. Plasma Phys.* **52**, 33 (2012).
42. A. Becker, N. Nettelmann, B. Holst, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **88**, 045122 (2013).
43. R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge Univ. (2020).
44. S. J. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
45. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
46. В. Е. Фортов, *Физика высоких плотностей энергии*, Физматлит, Москва (2013).
47. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, *ТВТ* **6**, 410 (1968).
48. И. Л. Иосилевский, А. Н. Старостин, в сб. *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, т. 1, под ред. В. Е. Фортова, Наука, Москва (2000), с. 327.
49. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, *ЖЭТФ* **146**, 518 (2014).
50. А. А. Пяллинг, *ТВТ* **48**, 181 (2010).
51. M. Schlages, M. Bonitz, and A. Tschtschjan, *Contrib. Plasma Phys.* **35**, 109 (1995).
52. D. Saumon, G. Chabrier, and H. M. Van Horn, *Astrophys. J. (Suppl)* **99**, 713 (1995).
53. А. В. Украинец, И. Л. Иосилевский, в сб. *Физика экстремальных состояний вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Изд-во ИПХФ РАН, Черноголовка (2005), с. 181.
54. J. M. McMahon, M. A. Morales, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1607 (2012).
55. M. A. Morales, C. Pierleoni, E. Schwegler, and D. M. Ceperley, *PNAS USA* **107**, 12799 (2010).
56. G. Mazzola, R. Helled, and S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 025701 (2018).
57. H. Y. Geng, Q. Wu, M. Marqués, and G. J. Ackland, *Phys. Rev. B* **100**, 134109 (2019).
58. И. Л. Иосилевский, *Аномальная термодинамика и проблема фазовых переходов в плотном и горячем водороде (дейтерии)*, Межд. конф. «XXI Харитоновские тематические научные чтения», Россия, Саров, 15–19 апреля 2019 г. (пленарный доклад).
59. А. Б. Медведев, Р. Ф. Трунин, *УФН* **182**, 829 (2012).
60. M. P. Desjarlais, M. D. Knudson, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **101**, 104101 (2020).
61. А. Б. Медведев, *ФГВ* **54**(2), 98 (2018).
62. M. A. Morales, S. Hamel, K. Caspersen, and E. Schwegler, *Phys. Rev. B* **87**, 174105 (2013).
63. B. Militzer, *Phys. Rev. B* **87**, 014202 (2013).
64. M. Schöttler and R. Redmer, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 115703 (2018).